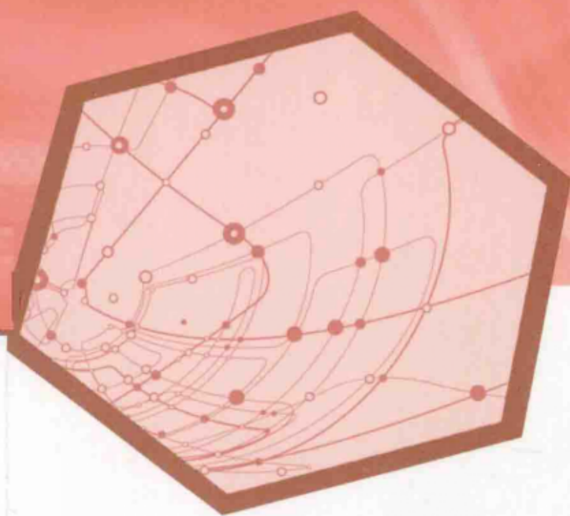
Matrix Analysis and Computation

矩阵分析与计算

李继根 张新发 编著





WUHAN UNIVERSITY PRESS
武汉大学出版社

责任编辑　胡　艳
责任校对　王　建
版式设计　苗　江
封面设计　苗　江



ISBN 978-7-307-11546-0

定价：60.00元

矩阵分析与计算

李继根 张新发 编著

武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

矩阵分析与计算/李继根,张新发编著. —武汉:武汉大学出版社,2013.10
ISBN 978-7-307-11546-0

Ⅰ.矩…　Ⅱ.①李…　②张…　Ⅲ.①矩阵分析—高等学校—教材
②矩阵—计算方法—高等学校—教材　Ⅳ.①O151.21　②O241.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 210341 号

出版:**武汉大学出版社**　(430072　武昌　珞珈山)
　　(电子邮件:cbs22@whu.edu.cn 网址:www.wdp.com.cn)
印刷:安徽新华印刷股份有限公司
开本:787×1092　1/16　印张:23.75　字数:546 千字
版次:2013 年 10 月第 1 版　2013 年 10 月第 1 次印刷
ISBN 978-7-307-11546-0　定价:60.00 元

前 言

在著名的博文“理解矩阵”中，作者孟岩一上来就提出了令人困惑的问题：矩阵究竟是什么东西？这看似一个简单的问题，但其实很难回答，因为众所周知，越是简单的问题越难以说清楚.

最直观的说法就是“矩阵是一堆数，只是在其上规定了一些运算”，这有点类似于面向对象编程中的“类(class)”的概念. 究其原因，乃是矩阵从逻辑上可视为是从“自然数→实数→复数→超复数→向量→矩阵”推广而来，这也与其历史发展轨迹大致相当. 大家知道，人类对于数的研究已经贯穿了几千年的文明史，更遑论内涵更大、应用更广的“向量”乃至“矩阵”. 自上世纪末，G. W. 斯图尔特就拟以 5 册之巨著，戮力于阐释“矩阵算法”. 其实依我们愚见，关于矩阵“这堆数”，即使来个“百集连续剧”也难以穷尽. 因为“凡有井台处皆能歌柳词”，矩阵的“芳踪”正如柳永的词一般，“凡有多元处必有矩阵”. 如今关于矩阵的知识早已成为工程技术人员必备的数学基础知识，有人甚至认为它就是“研究生的线性代数 + 高等数学”. 这也说明线性代数和高等数学是学习矩阵分析课程的必备基础.

基于自身的工科背景，孟岩指出“矩阵是线性空间里的变换的描述”，并结合计算机图形学知识对之进行了详细阐释. 事实上，从更高的层面看，矩阵是泛函中的一种特殊的线性算子，可谓“矩阵即变换”. 了解泛函分析的读者都知道，这已经是用泛函的眼光来看待矩阵了. 一般可将矩阵的理论知识大致划分为“空间与变换”、“矩阵分解论”以及“矩阵分析论”，其中“空间与变换”依托的就是泛函分析与抽象代数，因此以变换的眼光看待矩阵，自然就具有高屋建瓴之势. 这就意味着我们在教材编写和实际教学中，既要通过大量实例丰富读者的感性认识，又要极力渗透泛函分析的初步知识，以使读者逐步养成“一览众山小”的视野. 当然，不同学科背景的读者自然会收获不同的“感性+理性”.

在名著《古今数学思想》中，M. 克莱因写道：

(行列式与矩阵)在数学上并不是大的改革……尽管行列式和矩阵用做紧凑的表达式，尽管矩阵在领悟群论的一般定理方面具有作为具体的群的启发作用，但它们都没有深刻地影响数学的进程. 然而已经证明这两个概念是高度有用的工具，现在是数学器具的一部分.

在该书出版的 1972 年，他的观点无可厚非. 但计算机的飞速发展和信息社会的如火如荼，使得矩阵世界在这几十年里发生了翻天覆地的变化.

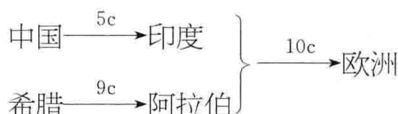
首先是矩阵计算(又称数值线性代数)的异军突起. 计算机的横空出世给线性代数研究带来了新的机遇和挑战，极大地促进了矩阵计算乃至科学计算的兴起和发展，使得原本被许多人认为已经“寿终正寝”的线性代数“枯木逢春”. 反过来，矩阵计算的研究以及 Matlab 等计算软件的不断改进，更是成为大规模、高速、并行、移动、网络计算中的得力工

具,这进一步促进了诸如"模型降阶"等化解"维数之咒"的新兴课题的蓬勃发展. 世界顶尖的数值分析学家 L. N. Trefethen 早在 1997 年就深刻地指出:

如果除了微积分与微分方程之外,还有什么领域是数学科学的基础的话,那就是数值线性代数.

世界上最大的专业学术组织 IEEE(电器与电子工程师学会)主办的《科学与工程计算》杂志,在 2000 年评选出了"20 世纪十大算法",其中就有 3 个与矩阵计算直接相关,它们是 1950 年提出的 Krylov 子空间迭代法、1951 年提出的矩阵计算的分解方法以及 1959 年至 1961 年间提出的计算矩阵特征值的 QR 算法.

此外,吴文俊先生的数学史研究,校正了人们对数学世界的看法. 受西方中心论的束缚,之前人们一直认为"中国古代数学著作都是应用问题集","在古代中国的数学思想中,最大的缺点是缺少严格求证的思想". 吴文俊先生通过大量分析,明确推出"近代数学之所以能够发展到今天,主要是靠中国(式)的数学,而非希腊(式)的数学,决定数学历史发展进程的主要是靠中国(式)的数学,而非希腊(式)的数学",并将中世纪数学发展过程概括为:



其中,c 表示世纪. 他深刻地指出:

从数学有史料为依据的几千年发展过程来看,以公理化思想为主的演绎倾向以及以机械化思想为主的算法倾向互为消长.

……

我国传统数学有其自身的发展途径与独到的思想体系,而以机械化为其特色;方程求解尤其是贯穿两千多年发展中的一条主线. 这与遵循古希腊传统的西方数学的公理化演绎体系大相径庭,旨趣迥异. 在历史长河中,数学机械化算法体系与数学公理化演绎体系曾多次反复互为消长交替成为数学发展中的主流.

这就从理论上回答了什么是世界数学发展的主流问题. 当然,与吴文俊先生的研究遥相辉映的是,当时科学哲学领域也兴起了以库恩为代表的新历史主义学派.

吴文俊先生的研究更使我们明确意识到:对待演绎体系与算法体系,合理的态度应该是取两者之长,兼收并蓄,而不能厚此薄彼,褒一贬一. 比如矩阵计算领域的奠基性大师豪斯霍尔德,最先研究的是泛函分析,之后转向生物数学,最终建功立业于矩阵计算领域. 事实上,深厚的数学基础和丰富的计算机知识是从事矩阵计算的必要条件.

另外,布尔巴基学派的"结构数学"也给人们带来了极大的冲击. 自 20 世纪 30 年代兴起的结构数学,在系统地整理了数学知识的同时,更给数学教育带来了"新数学运动". 但由于"新数学运动"一味注重形式上的严格性,忽视乃至抹杀数学的直觉性,使得学生的数学学习跌跌撞撞,步履踉跄,满满的都是泪水,学生也恍如杂技中表演钻火圈游戏的小白鼠,在考试的皮鞭挥舞之下拼命奔跑,完全变成了枯燥的规则的奴隶.

正是基于上述认识,我们认为,在矩阵分析课程的教学中,我们更需要的是"返璞归真改变思维",是"抛弃各种有形和无形的思想枷锁"(钱旭红语). 因此在本教材的体系、选材和编写中,我们力求突出以下特点:

1. 重新整合内容体系，兼顾矩阵计算

从实践角度看，矩阵分析处理的是线性化以后的非线性问题，它已经深入到了数值求解的每个领域，其后续是数值分析(包括矩阵计算、微分方程数值解等分支学科)的理论、算法及其语言实现. 因此我们认为，应该将矩阵分析类课程看成是实践性很强的理论性课程. 然而由于方方面面的制约，目前已有的教材都很少涉及实践性方面，而这正是我们希望通过本书加以弥补并大力宣扬的目标之一. 为此，我们精心挑选了矩阵计算中处理三大核心问题(线性方程组求解、最小二乘问题和特征值问题)的一些最重要的数值方法，尽可能详细地阐明它们的设计思想和理论依据，并重新整合矩阵分析的内容，尽可能使两者无缝连接，以避免给人以突兀之感. 例如，在回顾了线性方程组的知识之后，我们通过高斯消元法，引入了 LU 分解，进而自然地导出了线性方程组的数值求解问题.

在本书中，我们还通过分析 Matlab 软件的内置函数和帮助文档，将其中已公开的实现算法中所涉及的矩阵计算理论细节与课程教学紧密联系起来，以便读者理解计算结果，例如 Jordan 标准型与内置函数 jordan、矩阵指数与内置函数 expm、LU 分解与内置函数 lu、QR 分解与内置函数 qr、奇异值分解与内置函数 svd，等等. 对于本书中所使用的 Matlab 代码，需要的读者请来邮索取.

2. 注重启发式教学，力争将“冰冷的美丽”转变成“火热的思考”

以定义开头，继之以定理和公式，再辅以应用，这似乎成了数学类教材的典型模式. 这种形式化的编书方式，经常让学生觉得数学概念就像孙悟空一样，是从石头缝里蹦出来的. 对这种“空降部队”，学生从心理上难以接受，也使得“从问题出发抽象出数学知识再回到问题”这种丰富多彩的数学思维活动被“掐了两头，只剩中间”，变成了纯粹的逻辑推理，从定理到定理，从结论到结论. 作为面向非数学类工科学生的教材，如果也采取这种模式，对学生而言，无异于梦魇.

事实上，作为启发式教学的重要辅助工具，教材必须充分反映学生的思维过程，要通过一系列启发性的问题和各种各样的尝试和想法，让学生在观察、比较和推理中形成结论. 我们在本书中充分注意学生已有的基础和经验，注重采用多种方式自然地引入数学基本概念和基本方法. 例如，从齐次方程组的求解引入向量空间，从向量空间和微积分引入线性空间，从 Gram-Schmidt 方法引入 QR 分解，利用几何直观引入 SVD，从对角化问题引入正规变换及其矩阵，从向量的长度引入向量范数及矩阵范数，从高斯消元法引入 LU 分解，等等.

3. 适当增加矩阵的各类应用，淡化部分结论的理论证明

为了加强本课程对修读学生的吸引力，以利于学生快速进入实践环节，同时为了充分展示矩阵工具的强大，教材中还加入了一些具体应用. 当然，我们也希望通过它们，提供解决实际问题的理论框架和思想方法. 这些应用，既包括数学内部的应用，比如矩阵的谱半径、线性方程组的扰动分析、线性方程组迭代法的敛散性分析、微分方程数值解，也包括跨学科的各种应用，比如线性系统中的状态空间理论、运动分析及能控性和能观性、模式识别中的模式分类问题、主成分分析法(PCA)、图像压缩，等等.

考虑到教学中的实际情况及篇幅，编者适当略去了部分定理的证明，并对部分内容做了简化处理. 需要深入研究的读者，可参阅书后所附的参考文献.

4. 渗入数学史及数学文化，增强教材的趣味性和可读性

为了活跃课堂气氛，在课程讲授中，我们经常提及数学史及数学文化，但因为时间关系，师生都觉得不过瘾. 在撰写本书的过程中，与学生多有互动，他们也希望能在书中多讲点这些知识，以增加课程的趣味性. 我们的想法写进书以后，课堂上就不必多费口舌了. 当然，讲什么和讲多少是个问题.

首先，我们以较大的笔墨(2.1.3 和 2.1.4 共两小节)，比较详细地阐述了向量空间的历史，以期让读者初步领略公理化思想所带来的革命性变化，从而在感叹“向量空间”这个最重要的观念来之不易的同时，能够更深刻地领悟到矩阵计算对公理化思想的反拨，进而建立起更加理性的数学态度.

其次，基于我们对矩阵分析与计算发展历史的理解，对于与重要思想有关的重要人物，我们也特辟专节加以详细阐述. 比如提出 Jordan 标准型的艾米尔 · 约当、提出 Householder 变换的豪斯霍尔德、提出 Hermite 变换的埃尔米特、发现 SVD 的 G. H. 戈卢布、提出雅可比迭代和雅可比矩阵的雅可比、提出 Rayleigh 商的瑞利勋爵，以及提出 Lanczos 过程的兰乔斯，等等. 当然，限于篇幅，我们只能“故意遗漏”一些重要思想和人物，比如向后扰动分析法的创始人和代数特征值问题上的大师威尔金森、制定浮点数标准的卡亨，等等. 至于与相对次要的思想有关的人物，我们也尽量给予一定笔墨，比如发现 LU 分解的图灵、发现施密特正交化的施密特、提出 Schur 引理的舒尔、提出 Galerkin 方法的伽辽金、提出 Krylov 子空间的克雷洛夫，等等.

再次，我们还刻意凸显了课程中的“中国元素”. 例如高斯消元法与《九章算术》、嵌套乘法与秦九韶算法、范数与樊畿先生，等等. 这在西方人占据主导的矩阵知识中，是弥足珍贵的.

感谢何志庆教授在出国前夕的百忙之中审阅了大部分书稿. 感谢鲁习文教授、刘朝晖教授、李建奎教授和张先梅教授等院系领导对本教材给与的大力支持，还要感谢周国标教授给予笔者的点金之语，以及刘剑平教授对本教材的热忱关注. 另外，要特别感谢华东理工大学教务处相关领导及校教材建设委员会的诸位专家，蒙他们垂青，本书得以忝列 2012 年度教材立项项目.

我们深知，不仅矩阵所涉方方面面皆博大精深，而且对知识和思想真正的吸纳与融会也是任重而道远. 在戴维 · 洛奇的《小世界》中，年轻的柏斯苦苦追寻着心中的“莎士比亚”. 对于矩阵这个“心中的圣殿”，不年轻的我们也心有戚戚焉. 夫学术者，天下之公器也. 我们衷心期望的是，当我们怯怯地“放下第二步”的时候，听到的不是“第一步空寥的回声”(何其芳《预言》). 书中不当乃至谬误之处，诚盼各位方家高手来函批评指正. 来信请邮至：jgli@ecust.edu.cn

编　者

于华东理工大学数学系

目　录

第1章 线性方程组

微积分中对非线性问题采用线性化处理之后，就产生了大量线性方程组求解问题. 在线性代数中，借助于"秩"这个核心概念，线性方程组解的三种状态得到完美的阐述，因此线性代数作为研究课题一度被认为已"寿终正寝". 然而计算机的横空出世，使得线性代数"枯木逢春"，催生出发展最快、思想也空前活跃的数值线性代数(又称矩阵计算). 如今，几乎所有的数值计算软件都具有求解线性方程组的功能. 事实上，它们大都以线性代数软件包 LAPACK (Linear Algebra PACKage) 为基础，其中涉及的基本代数子程序 BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)在高性能计算领域更是被广泛应用.

1.1 线性方程组的解法回顾

1.1.1 从高斯消元法谈起

让我们先来求解一个线性方程组.

例 1.1.1 解线性方程组

$$(\text{I}):\begin{cases} x_1+2x_2-x_3=0 & ① \\ 3x_1+x_2=-1 & ② \\ -x_1-x_2-2x_3=1 & ③ \end{cases} \tag{1.1.1}$$

众所周知，我们可以采用被高斯(C. F. Gauss，1777—1855)重新发现的消元策略来求解这个线性方程组，这样就得到了如下的**初等行变换法**(elementary row transformation of matrix，也称**高斯消元法**).

解法一:初等行变换法.

首先是**消元过程**(elimination process).

$$(\text{I})\xrightarrow[1\times①+③]{(-3)\times①+②}\begin{cases} x_1+2x_2-x_3=0 & ① \\ -5x_2+3x_3=-1 & ② \\ x_2-3x_3=1 & ③ \end{cases}\xrightarrow{\frac{1}{5}\times②+③}\begin{cases} x_1+2x_2-x_3=0 & ① \\ -5x_2+3x_3=-1 & ② \\ -\frac{12}{5}x_3=\frac{4}{5} & ③ \end{cases}$$

$$\xrightarrow{(-\frac{5}{12})\times③}(\text{II}):\begin{cases}x_1+2x_2-x_3=0 & ①\\ -5x_2+3x_3=-1 & ②\\ x_3=-\dfrac{1}{3} & ③\end{cases}$$

接下来是**回代过程**(back substitution process).

$$(\text{II})\xrightarrow[1\times③+①]{(-3)\times③+②}\begin{cases}x_1+2x_2=-\dfrac{1}{3} & ①\\ -5x_2=0 & ②\\ x_3=-\dfrac{1}{3} & ③\end{cases}\xrightarrow{(-\frac{1}{5})\times②}\begin{cases}x_1+2x_2=-\dfrac{1}{3} & ①\\ x_2=0 & ②\\ x_3=-\dfrac{1}{3} & ③\end{cases}$$

$$\xrightarrow{(-2)\times②+①}(\text{III}):\begin{cases}x_1=-\dfrac{1}{3} & ①\\ x_2=0 & ②\\ x_3=-\dfrac{1}{3} & ③\end{cases}$$

上述过程用矩阵形式可简洁地表示如下：

$$\bar{\boldsymbol{A}}=\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&-1&0\\3&1&0&-1\\-1&-1&-2&1\end{array}\right)\underset{r_{13}(1)}{\overset{r_{12}(-3)}{\sim}}\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&-1&0\\0&-5&3&-1\\0&1&-3&1\end{array}\right)$$

$$\overset{r_{23}(1/5)}{\sim}\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&-1&0\\0&-5&3&-1\\0&0&-12/5&4/5\end{array}\right)\overset{r_3(-5/12)}{\sim}\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&-1&0\\0&-5&3&-1\\0&0&1&-1/3\end{array}\right)$$

$$\underset{r_{31}(1)}{\overset{r_{32}(-3)}{\sim}}\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&0&-1/3\\0&-5&0&0\\0&0&1&-1/3\end{array}\right)\overset{r_2(-1/5)}{\sim}\left(\begin{array}{ccc:c}1&2&0&-1/3\\0&1&0&0\\0&0&1&-1/3\end{array}\right)\overset{r_{21}(-2)}{\sim}\left(\begin{array}{ccc:c}1&0&0&-1/3\\0&1&0&0\\0&0&1&-1/3\end{array}\right)$$

所以 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}=\left(-\dfrac{1}{3},0,-\dfrac{1}{3}\right)^{\mathrm{T}}$.

利用矩阵的乘法及分块矩阵的知识，可以证明以下定理：

定理 1.1.1　(初等变换与矩阵乘法) 对 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 施行一次初等行变换(一次初等列变换)，相当于在 $\boldsymbol{A}$ 的左边(右边)乘以相应的 m 阶行初等矩阵 $\boldsymbol{R}$（n 阶列初等矩阵 $\boldsymbol{C}$），即

$$\boldsymbol{A}\xrightarrow{\text{一次行初等变换}}\boldsymbol{B}\Leftrightarrow\boldsymbol{B}=\boldsymbol{RA},\ \boldsymbol{A}\xrightarrow{\text{一次列初等变换}}\boldsymbol{B}\Leftrightarrow\boldsymbol{B}=\boldsymbol{AC}\tag{1.1.2}$$

由于可逆矩阵可以分解成有限个初等矩阵的乘积，因此定理 1.1.1 的结论可推广到可逆矩阵.

定理 1.1.2　(初等变换与可逆矩阵) 对 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 施行一系列初等行变换 r_1, $r_2,\cdots,r_s$（初等列变换 $c_1,c_2,\cdots,c_t$），相当于在 $\boldsymbol{A}$ 的左边(右边)乘以相应的 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_s\cdots\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{R}_1$（$n$ 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_2\cdots\boldsymbol{C}_t$），即

$$\boldsymbol{A}\xrightarrow{r_1,r_2,\cdots,r_s}\boldsymbol{B}\Leftrightarrow\boldsymbol{B}=\boldsymbol{RA},\quad\boldsymbol{A}\xrightarrow{c_1,c_2,\cdots,c_t}\boldsymbol{B}\Leftrightarrow\boldsymbol{B}=\boldsymbol{AC}\tag{1.1.3}$$

其中，行初等矩阵 $\boldsymbol{R}_i$ 对应 r_i，列初等矩阵 $\boldsymbol{C}_j$ 对应 c_j（$i=1,2,\cdots,s;j=1,2,\cdots,t$）.

按定理1.1.2,如果 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过一系列初等变换化为 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{B}$,则意味着存在 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}$ 及 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{C}$,使得

$$\boldsymbol{RAC}=\boldsymbol{B} \tag{1.1.4}$$

此时,我们称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ **等价**(equivalence),记为 $\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{B}$.

当系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时,线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的解为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$. 若能求出 $\boldsymbol{A}^{-1}$,即可求得线性方程组的解. 在式(1.1.3)中,设 $\boldsymbol{RA}=\boldsymbol{I}$,也就是 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{A}^{-1}$,此时,式(1.1.3)显然可理解成 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^1$ 被一系列初等行变换 $r_1,r_2,\cdots,r_s$ 变换成了 $\boldsymbol{RA}=\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}^0$,即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的幂由1降为0,因此,若想得到 $\boldsymbol{A}^{-1}$,显然只需将同样的这一系列初等行变换 $r_1,r_2,\cdots,r_s$ 作用到 $\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}^0$ 上. 这样就产生了例1.1.1的第二种解法.

解法二:矩阵求逆法.

先求系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵.

$$(\boldsymbol{A}\,\vdots\,\boldsymbol{I})=\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&-1&1&0&0\\3&1&0&0&1&0\\-1&-1&-2&0&0&1\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&-1&1&0&0\\0&-5&3&-3&1&0\\0&1&-3&1&0&1\end{array}\right)$$

$$\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&-1&1&0&0\\0&-5&3&-3&1&0\\0&0&-12/5&2/5&1/5&1\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&-1&1&0&0\\0&-5&3&-3&1&0\\0&0&1&-1/6&-1/12&-5/12\end{array}\right)$$

$$\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&0&5/6&-1/12&-5/12\\0&-5&0&-5/2&5/4&5/4\\0&0&1&-1/6&-1/12&-5/12\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&2&0&5/6&-1/12&-5/12\\0&1&0&1/2&-1/4&-1/4\\0&0&1&-1/6&-1/12&-5/12\end{array}\right)$$

$$\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&0&0&-1/6&5/12&1/12\\0&1&0&1/2&-1/4&-1/4\\0&0&1&-1/6&-1/12&-5/12\end{array}\right),$$

所以

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\begin{pmatrix}-1/6&5/12&1/12\\1/2&-1/4&-1/4\\-1/6&-1/12&-5/12\end{pmatrix}=\frac{1}{12}\begin{pmatrix}-2&5&1\\6&-3&-3\\-2&-1&-5\end{pmatrix}.$$

注意到线性方程组(I)等价于 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$,这里 $\boldsymbol{b}=(0,-1,1)^{\mathrm{T}}$,因此 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}=\left(-\frac{1}{3},0,-\frac{1}{3}\right)^{\mathrm{T}}$.

在线性代数中,我们还学习了求解线性方程组的伴随矩阵法和克莱姆法则. 克莱姆法则来源自克莱姆(Gabriel Cramer,1704—1752)于1750年出版的著作,可事实上,它最早由麦克劳林(Colin Maclaurin,1698—1746,如今以麦克劳林级数闻名于后世)创立于

1729 年,并写入其 1748 年出版的遗作《代数学》之中. 数学史上充满了这样的"误称定律"(the law of misonomy),即当代科学史专家斯蒂芬·施蒂格勒(Stephen Stigler)提出的一个富有戏谑性的说法:"Nothing in mathematics is ever named after the person who discovered it."

解法三:伴随矩阵法.

由于 $|\boldsymbol{A}|=12$,且 $A_{11}=-2,A_{12}=6,A_{13}=-2,A_{21}=5,A_{22}=-3,A_{23}=-1,A_{31}=1,A_{32}=-3,A_{33}=-5$.

所以 $\boldsymbol{A}^{-1}=\frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\boldsymbol{A}^*=\frac{1}{12}\begin{pmatrix}-2&5&1\\6&-3&-3\\-2&-1&-5\end{pmatrix}$,其中 $\boldsymbol{A}^*$ 表示 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵. 从而

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}=\left(-\frac{1}{3},0,-\frac{1}{3}\right)^{\mathrm{T}}$$

解法四:克莱姆法则.

由于 $D=|\boldsymbol{A}|=12\neq 0$,且

$$D_1=\begin{vmatrix}0&2&-1\\-1&1&0\\1&-1&-2\end{vmatrix}=-4,\ D_2=\begin{vmatrix}1&0&-1\\3&-1&0\\-1&1&-2\end{vmatrix}=0,\ D_3=\begin{vmatrix}1&2&0\\3&1&-1\\-1&-1&1\end{vmatrix}=-4$$

因此 $\boldsymbol{x}=\left(\frac{D_1}{D},\frac{D_2}{D},\frac{D_3}{D}\right)^{\mathrm{T}}=\left(-\frac{1}{3},0,-\frac{1}{3}\right)^{\mathrm{T}}$.

思考:在如此诱人的"四朵金花"中,哪一朵才是最娇艳欲滴的呢?

这个问题读者可能一时难以回答. 不过只要查阅一下 Matlab 软件的内置函数,我们就能给出初步解答. 事实上,Matlab 提供了内置函数 rref ,可将矩阵化成最简型,同时,Matlab 也提供了内置函数 inv,可用于求矩阵的逆. 当然也可以借助幂运算符(本质上也是内置函数)"^"或左除运算符(本质上也是内置函数)"\"来求解线性方程组,具体代码如下:

```
A= [1 2 - 1;3 1 0;- 1 - 1 - 2];b= [0 - 1 1]'; Ab= [A b];
%方法一:初等行变换法
[U,ip]= rref(Ab); U(:,ip)= [ ]; x= U;
%方法二:矩阵求逆法
x= inv(A)* b  % x= A^(- 1)* b
```

遗憾的是,Matlab 中没有为伴随矩阵法和克莱姆法则提供专门的内置函数(我们当然可以自己编程实现,需要的读者可来邮索取配套程序),这是否已暗示了哪一朵"金花"是最娇艳欲滴的了呢?

1.1.2　计算复杂性分析

关于"金花"问题,前面基于 Matlab 的分析显然只涉及问题的表象,我们需要深入探讨问题的本质,以给出更有说服力的解答. 特别要注意的是,我们要从各个角度尽可能地将问题一般化,这意味着在"金花"问题中,具体的系数矩阵要被一般化为任意的可逆矩阵 $\boldsymbol{A}$,矩阵的阶数要从 3 阶一般化为 n 阶,因此线性方程组 (I) 将被一般化为线性方程组

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶可逆方阵.

判断一个算法的优劣，有很多标准，其中涉及算法效率的计算复杂性分析，主要指算法执行时需要消耗的计算机资源的“时”、“空”分析，包括运行时间的开销（**时间复杂度**）和存储的开销（**空间复杂度**）. 显然，时间复杂度越小，说明该算法效率越高，因此该算法越有价值；而空间复杂度越小，则说明算法越好. 我们当然希望算法“又快又省”，但鱼与熊掌往往不可兼得. 考虑到人生苦短，我们一般采取“空间换时间”的策略，即主要考虑降低时间复杂度，同时兼顾甚至牺牲空间复杂度.

由于计算机性能的差异，显然不能用时间的绝对量来“测度”算法的时间复杂度，更加合理的应该是采用算法的基本运算次数，也就是算法的所有运算次数的总和. 具体到矩阵算法问题，正如“维数灾难”所揭示的那样，矩阵的大小显然影响矩阵的运算量，以此观之，时间复杂度就是矩阵维数的函数. 对于 n 阶方阵而言，可记时间复杂度为 $T(n)$. 这样，我们就可以引入算法复杂度的阶数的概念.

定义 1.1.1　(算法复杂度的阶数) 如果存在正常数 C 和 N，使得当 $n>N$ 时，对于某矩阵算法的时间复杂度 $T(n)$，总成立函数 $f(n)$，使得 $T(n)\leqslant Cf(n)$，则称该算法的时间复杂度 $T(n)$ 是 $f(n)$ 阶的，并借鉴高等数学中表示同阶无穷小的大 O 表示法，记作 $T(n)=O(T(n))$.

对于一些常用的 $f(n)$，成立下列重要关系：

$$O(1)<O(\log n)<O(n)<O(n\log n)<O(n^2)<O(n^3)<$$
$$O(2^n)<O(3^n)<O(n!)<O(n^n) \tag{1.1.5}$$

值得一提的是，$O(n^3)$ 与 $O(2^n)$ 是一个重要的分水岭，前者说明时间复杂度 $T(n)$ 是 n 的多项式函数，当 n 增长时，$T(n)$ 的增长是可以忍受的，因此相应的算法被视为“好”的算法；后者则说明 $T(n)$ 是 n 的指数函数，当 n 增长时，$T(n)$ 的增长让人难以忍受，因此相应的算法被视为“坏”的算法. 如果某问题存在多项式算法，即“好”的算法，则该问题为多项式时间可解问题，简称**多项式**(polynomial)**问题**. 与之相关的 P/NP 问题(NP, non-deterministic polynomial)是计算复杂性理论(computational complexity theory)中至今尚未解决的问题.

下面我们从计算复杂性的视角来深入分析“金花”问题.

我们知道，拉普拉斯展开定理将一个 n 阶行列式的计算转化为 n 个 $n-1$ 阶行列式的计算. 若按此定理来计算行列式，并用 $T(n)$ 表示 n 阶行列式的时间复杂度，那么显然可有 $T(n)=nT(n-1)$，从而 $T(n)=nT(n-1)=n(n-1)T(n-2)=\cdots=n!T(1)$，因此这种算法的时间复杂度 $T(n)$ 是 $n!$ 级的，即 $T(n)=O(n!)$，这显然是比指数增长 $O(2^n)$ 还要“坏”的算法. 所以，尽管拉普拉斯展开定理在理论上非常重要，但在计算上一般仅用于低阶或特殊的行列式.

克莱姆法则要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，按拉普拉斯展开定理折算，这相当于计算一个 $n+1$ 行列式，即时间复杂度 $T(n)$ 是 $(n+1)!$ 级的；伴随矩阵法要计算 1 个 n 阶行列式以及 n^2 个 $n-1$ 阶的代数余子式，后者相当于 n 个 n 阶行列式，因此总体计算量相当于一个 $n+1$ 行列式，时间复杂度 $T(n)$ 也是 $(n+1)!$ 级的，与克莱姆法则持平. 这两朵“金花”的计算复杂度都是 $(n+1)!$ 级的，根据前面的分析，当维数达到一定规模后，这显然是

“不可能完成的任务”，我们只能忍痛割爱.

至于矩阵求逆法，显然比初等行变换法费时，这是因为前者求逆时要处理的长方形矩阵是 $n\times 2n$ 阶的，而且求出 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 后，还需要进行矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 与向量 $\boldsymbol{b}$ 的矩阵向量乘法 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$，而后者只需要处理 $n\times(n+1)$ 阶的长方形矩阵，并且不必处理矩阵向量乘法 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$.

至此，我们不难发现，基于高斯消元策略的初等变换法最娇艳欲滴的那朵“金花”. 一句话：变换是王道！

思考：(1) 初等行变换法的时间复杂度是多少？

(2) Matlab 提供了内置函数 det，用于计算方阵的行列式. 问题是，既然拉普拉斯定理不能用于高阶行列式的数值计算，那么高阶行列式的数值算法又是基于什么原理呢？

1.1.3 历史开了个大玩笑

1801 年，年仅 24 岁的高斯出版了划时代的巨著《算术研究》. 在书中，他围绕三个核心课题，即同余理论、二次型理论和二次互反律，系统地整理了前人在数论中的各种零星成果. 在书中的二次型理论中，高斯系统地推广了欧拉(Leonhard Euler，1707－1783)、拉格朗日(Joseph-Louis Lagrange，1736－1813)等人的二次型理论，将整数 n 表示成整数 a、b、c、x、y 的二次型，即

$$F(x,y)=ax^2+bxy+cy^2=n$$

然后通过变换

$$\begin{cases}x=\alpha x'+\beta y' & ①\\ y=\gamma x'+\delta y' & ②\end{cases}\tag{1.1.6}$$

将 $F(x,y)$ 变换成新的二次型 $F'(x',y')=a'x'^2+b'x'y'+c'y'^2$，其中 $b'^2-a'c'=(b^2-ac)(\alpha\delta-\beta\gamma)^2$. 高斯进而指出，如果 $(\alpha\delta-\beta\gamma)^2=1$，则可将 $F'(x',y')$ 变换成 $F(x,y)$，从而导出了他的“型等价”的概念. 而他得到相应变换的方法，就体现了消元法的思想，即把式 (1.1.6) 看成关于 x'，y' 的线性方程组，然后由 ①×δ－②×β，得 $\delta x-\beta y=(\alpha\delta-\beta\gamma)x'$，由 ②×$\alpha$－①×$\gamma$，得 $-\gamma x+\alpha y=(\alpha\delta-\beta\gamma)y'$，当 $D=\alpha\delta-\beta\gamma\neq 0$ 时，即得所需的变换

$$\begin{cases}x'=\dfrac{\delta}{D}x+\dfrac{-\beta}{D}y & ①\\[2ex] y'=\dfrac{-\gamma}{D}x+\dfrac{\alpha}{D}y & ②\end{cases}\tag{1.1.7}$$

其中的系数都是整数，因为 $D^2=1$.

高斯的消元法思想隐藏在二次型理论中，晦涩难明. 可是实际上，“消元法是中国的”，因为中国早在秦汉时期就已明确给出了线性方程组的这种解法. 图 1－1 是现藏于上海博物馆的东汉光和大司农铜斛，其器口、底沿刻有相同的 89 字铭文：“大司农以戊寅诏书，秋分之日，同度量、均衡石、

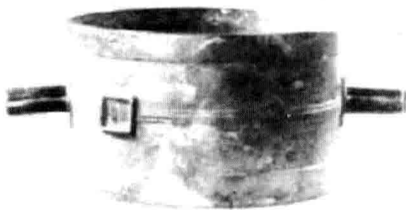


图 1－1 光和大司农铜斛

捔斗桶、正权概，特更为诸州作铜斗斛、称尺，依黄钟律历、九章算术，以均长短、轻重、大小，用其七政，令海内都同，光和二年闰月廿三日，大司农曹祾、丞淳于宫、右仓曹掾朱音、史韩鸿造.”铭文中作为制器依据被提及的《九章算术》(见图 1－2)一书，肯定更早于光和二年(公元 179 年). 数学史界一般认定该书的主要内容“在先秦已具备，因秦及秦末战乱散坏，经西汉张苍、耿寿昌先后删补而成”. 后世的中国古代数学家，大都是从《九章算术》开始学习和研究数学，曹魏时期的刘徽等人还曾为它作过注释.

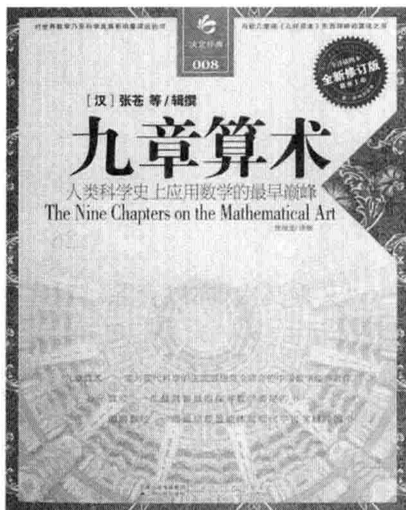


图 1－2　《九章算术》

《九章算术》以实际应用为目的，前六章(即方田、粟米、衰分、少广、商功和均输)中的问题涵盖了人们日常生活、生产中的各种实际问题，书中非常重视计算，包括了大量计算公式或计算程序(即算法)，充分体现了中国古代数学的“构造性与机械化”(吴文俊语)特色. 特别是在第八章方程中，不仅通过算筹的筹式表示了线性方程组的增广矩阵，而且还通过筹算，实际上给出了求解线性方程组的初等变换法. 我们不妨通过一个典型事例，来看一下古人的解法.

例 1.1.2　《九章算术》第八章方程第一题：“今有上禾(指上等稻子)三秉(捆)，中禾二秉，下禾一秉，实(谷子)三十九斗；上禾二秉，中禾三秉，下禾一秉，实三十四斗；上禾一秉，中禾二秉，下禾三秉，实二十六斗. 问上、中、下禾实一秉各几何?”若按现代的记法，设 x_1、x_2、x_3 依次为上、中、下禾各一秉的谷子数，则上述问题就是求解三元一次方程组：

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + x_3 = 39 \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 = 34 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 26 \end{cases}$$

该书中是这样描述求解方法的：“置上禾三秉，中禾二秉，下禾一秉，实三十九斗，于右方. 中、左行列如右方. ”此即如下左侧所示图表(注意古代的阅读习惯是从右至左). 右侧为矩阵记号.

$$\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 2 \\ 3 & 1 & 1 \\ 26 & 34 & 39 \end{array} \qquad \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & 39 \\ 2 & 3 & 1 & 34 \\ 1 & 2 & 3 & 26 \end{pmatrix}$$

然后，“以右行上禾遍乘中行，而后直除. ”这就是说，将中间这一列乘以系数 3 (右列中的上禾数)，再减去右列的一个倍数(本例中为系数 2). 用矩阵记号，即为先执行

$r_2(3)$，再执行 $r_{12}(-2)$.

$$\begin{array}{ccc} 1 & 0 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 1 \\ 26 & 24 & 39 \end{array} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 1 & 39 \\ 0 & 5 & 1 & 24 \\ 1 & 2 & 3 & 26 \end{array}\right)$$

“又乘其次，亦以直除.”对左列进行类似的操作. 用矩阵记号，即为先执行 $r_3(3)$，再执行 $r_{12}(-1)$.

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 3 \\ 4 & 5 & 2 \\ 8 & 1 & 1 \\ 39 & 24 & 39 \end{array} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 1 & 39 \\ 0 & 5 & 1 & 24 \\ 0 & 4 & 8 & 39 \end{array}\right)$$

“然以中行中禾不尽者遍乘左行，而以直除”，即用中间这一列的系数 5 乘以左列，再减去中列的 4 倍，并进行约分. 用矩阵记号，即为先执行 $r_3(5)$，再执行 $r_{23}(-4)$，然后用变换 $r_3(1/9)$ 约分了系数 36 和常数 99.

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 5 & 2 \\ 4 & 1 & 1 \\ 11 & 24 & 39 \end{array} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 1 & 39 \\ 0 & 5 & 1 & 24 \\ 0 & 0 & 4 & 11 \end{array}\right)$$

“左方下禾不尽者，上为法，下为实. 实即下禾之实.”这就是说，左列中的系数 4 称为**法**，常数 11 就是 4 秉下禾之实.

前面是“消元”的过程，接下来就是“回代”的过程.

“求中禾，以法乘中行下实，而除下禾之实. 余如中禾秉数而一，即中禾之实.”即用系数 4 乘以中列，再减去左列的 1 倍，并进行约分. 用矩阵记号，即为先执行 $r_2(4)$，再执行 $r_{32}(-1)$ 和 $r_2(1/5)$.

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 4 & 2 \\ 4 & 0 & 1 \\ 11 & 17 & 39 \end{array} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & 1 & 39 \\ 0 & 4 & 0 & 17 \\ 0 & 0 & 4 & 11 \end{array}\right)$$

“求上禾亦以法乘右行下实，而除下禾、中禾之实. 余如上禾秉数而一，即上禾之实.”即仍然用系数 4 乘以右列，再分别减去左列的 1 倍和中列的 2 倍，并进行约分. 用矩阵记号，即为先执行 $r_1(4)$，再执行 $r_{31}(-1)$ 和，最后用 $r_2(1/3)$ 进行约分.

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 4 \\ 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 0 \\ 11 & 17 & 37 \end{array} \qquad \vdots \qquad \left(\begin{array}{ccc:c} 4 & 0 & 0 & 37 \\ 0 & 4 & 0 & 17 \\ 0 & 0 & 4 & 11 \end{array}\right)$$

"实皆如法,各得一斗"即三个常数都除以法4,就得到了一秉上禾实、中禾实和下禾实的斗数分别为$9\frac{1}{4}$斗、$4\frac{1}{4}$斗和$2\frac{3}{4}$斗.

由于当时用抽象的语言难以表达明白,因此书中借助于禾实来阐述,正如刘徽所言:**"此都属也.以空言难晓,故特系之禾以决之."**然而中国人毕竟没有发展出矩阵理论.这一点,即使国外最严谨的数学史家卡茨(Victor J. Katz)也承认:"事实上,中国人的解法实质上与高斯消元法一致,而且是用矩阵的形式表示出来的."他遗憾地将这种情况的出现归之于中国人习惯于用文字表达所有问题及其解,却从未采用过"能使类似问题解起来毫不费力的符号系统".对此,我们只能在憧憬与缅怀之余,空自嗟叹.

1.2　矩阵的LU分解

类似于数(代数式)的因子(式)分解,矩阵的各种分解在矩阵计算中也扮演着相当重要的角色.矩阵的LU分解本质上是高斯消元法,因此其起源可追溯到《九章算术》或高斯.事实上,高斯使用的是对称正定矩阵的分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LD}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$.但用矩阵来表示它们,并在其中注入数值计算的思想,则是晚近才发生的事,尤其是计算机问世之后.

1.2.1　LU分解定理

在用初等行变换法求解线性方程组(1.1.1)的过程中,我们考察系数矩阵的变换情况:

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -2 \end{pmatrix} \underset{r_{13}(1)}{\overset{r_{12}(-3)}{\sim}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -5 & 3 \\ 0 & 1 & -3 \end{pmatrix} \overset{r_{23}(1/5)}{\sim} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -5 & 3 \\ 0 & 0 & -12/5 \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{U}$$

显然$\boldsymbol{U}$是上三角矩阵,其对角元1、-5和$-12/5$称为消去过程中的**主元**(pivot),三个变换$r_{12}(-3)$、$r_{13}(1)$和$r_{23}(1/5)$中使用的倍数被称为**乘子**(multiplier).

由定理1.1.1可知

$$\boldsymbol{R}_{23}(1/5)\,\boldsymbol{R}_{13}(1)\,\boldsymbol{R}_{12}(-3)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U} \tag{1.2.1}$$

因此

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=[\boldsymbol{R}_{23}(1/5)\,\boldsymbol{R}_{13}(1)\,\boldsymbol{R}_{12}(-3)]^{-1}\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{R}_{12}(-3)]^{-1}\,[\boldsymbol{R}_{13}(1)]^{-1}\,[\boldsymbol{R}_{23}(1/5)]^{-1}\boldsymbol{U}\\ &=\boldsymbol{R}_{12}(3)\,\boldsymbol{R}_{13}(-1)\,\boldsymbol{R}_{23}(-1/5)\boldsymbol{U}\end{aligned}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\3 & 1 & 0\\-1 & -1/5 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\0 & -5 & 3\\0 & 0 & -12/5\end{pmatrix}\equiv \boldsymbol{LU}$$

形如 $\boldsymbol{L}$ 这样的对角元都为 1 的下三角矩阵被称为**单位下三角矩阵**(unit lower triangular matrix). 类似地,我们称对角元都为 1 的上三角矩阵为**单位上三角矩阵**(unit upper triangular matrix).

思考:观察矩阵 $\boldsymbol{L}$ 下三角部分的 3 个元素,它们与所使用的 3 个行初等变换有什么关系?

定义 1.2.1 如果方阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分解成单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积,即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU} \tag{1.2.2}$$

则称式 (1.2.2) 为 $\boldsymbol{A}$ 的 **LU 分解**(LU decomposition,如图 1-3 所示)或**三角分解**(triangular matrix decomposition).



图 1-3 矩阵分解 $A=LU$[①]

据此,对线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$, 若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在 LU 分解,则有 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{LUx}=\boldsymbol{L}(\boldsymbol{Ux})=\boldsymbol{b}$, 这说明我们可通过求解两个特殊的三角方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$ 来求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$, 这就是 Matlab 等数值软件中采用的方法.

例 1.2.1 用 LU 分解重解线性方程组 (1.1.1).

解:由上述分析可知问题已转化为求解两个三角方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$, 即

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\3 & 1 & 0\\-1 & -1/5 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\-1\\1\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\0 & -5 & 3\\0 & 0 & -12/5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\y_3\end{pmatrix}$$

对第一个方程 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$, 采用向前消去法,可依次确定未知数 y_1, y_2, y_3, 即

$$y_1=0,\quad y_2=-1-3y_1=-1,\quad y_3=1+y_1+\frac{1}{5}y_2=\frac{4}{5}$$

接着采用向后消去法解第二个方程 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$, 则可依次确定未知数 x_3, x_2, x_1, 即

① 此图由华东理工大学信息学院 2012 级研究生赵明同学创作.

$$x_3 = \frac{4/5}{-12/5} = -\frac{1}{3}, \quad x_2 = -\frac{1}{5}(-1-3x_3) = 0, \quad x_1 = 0 - 2x_2 + x_3 = -\frac{1}{3}$$

显然例 1.2.1 中求解三角方程组的解法可推广到一般形式.

对于三角方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$，令 $\boldsymbol{L}=(l_{ij})_{n\times n}$，$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{b}=(b_1,b_2,\cdots,b_n)^{\mathrm{T}}$，则通过解第 i 个方程求出 y_i 即可得此解法的一般形式

$$y_i = b_i - l_{i1}y_1 - l_{i2}y_2 - \cdots - l_{i,i-1}y_{i-1} \tag{1.2.3}$$

如果 i 从 1 到 n 向前依次计算 $y_1,y_2,\cdots,y_n$，则 $\boldsymbol{y}$ 的所有分量都可求出.

对于三角方程组 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$，令 $\boldsymbol{U}=(u_{ij})_{n\times n}$，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，则通过解第 i 个方程求出 x_i 即可得此解法的一般形式

$$x_i = (y_i - u_{i,i+1}x_{i+1} - u_{i,i+2}x_{i+2} - \cdots - u_{i,n}x_n)/u_{ii} \tag{1.2.4}$$

如果 i 从 n 到 1 向后依次计算 $x_n,x_{n-1},\cdots,x_1$，则 $\boldsymbol{x}$ 的所有分量都可求出.

显然，在计算 y_i 的式(1.2.3)中，需要 $i-1$ 次乘法和 $i-1$ 次减法，因此该解法的总计算量为 $\sum_{i=1}^{n}(i-1+i-1)=n(n-1)$ 次，即时间复杂度为 $O(n^2)$；在计算 x_i 的式(1.2.4)中，需要 $n-i$ 次乘法，$n-i$ 次减法和一次除法，因此该解法的总计算量为 $\sum_{i=1}^{n}(n-i+n-i+1)=n^2$ 次，即时间复杂度也为 $O(n^2)$.

我们给出 Matlab 的相关代码段如下，其中我们用 y_i 覆盖了 b_i，因为 b_i 仅在计算 y_i 的公式中用到：

```
  for i= 2:n  %前向消去
     b(i)= b(i)- L(i,1:i- 1)* b(1:i- 1);
end
b(n)= b(n)/U(n,n) ;
for i= n- 1:- 1:1  %后向消去
    b(i)= (b(i)- U(i,i+ 1:n)* b(i+ 1:n))/U(i,i) ;
end
```

什么样的矩阵才有 LU 分解呢？因为 LU 分解可用于求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，我们自然先考虑可逆方阵 $\boldsymbol{A}$.

设有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$，根据行列式的柯西(Augustin Louis Cauchy，1789－1857)定理，即乘积的行列式等于行列式的乘积，并注意到 $|\boldsymbol{L}|=1$，则 $0\neq|\boldsymbol{A}|=|\boldsymbol{L}|\cdot|\boldsymbol{U}|=|\boldsymbol{U}|$，这说明矩阵 $\boldsymbol{U}$ 也是可逆矩阵，即其对角元都不为零. 将 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{L},\boldsymbol{U}$ 适当分块如下：

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_{11} & \boldsymbol{U}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{U}_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{L}_{11}\boldsymbol{U}_{11} & \times\\ \times & \times\end{pmatrix}$$

其中，"×"表示我们不关心相应的元素值，因此 $\boldsymbol{A}_{11}=\boldsymbol{L}_{11}\boldsymbol{U}_{11}$，从而

$$|\boldsymbol{A}_{11}|=|\boldsymbol{L}_{11}\boldsymbol{U}_{11}|=|\boldsymbol{L}_{11}|\,|\boldsymbol{U}_{11}|=1\cdot|\boldsymbol{U}_{11}|=|\boldsymbol{U}_{11}|$$

由于 $|\boldsymbol{U}_{11}|\neq 0$，因此 $|\boldsymbol{A}_{11}|\neq 0$. 分块矩阵 $\boldsymbol{A}_{11}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子矩阵，考虑到 $\boldsymbol{A}_{11}$

在阶数上的任意性,因此矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意阶顺序主子式都不为零. 显然,这个结论要比"矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆"强得多. 这个结论是否也是充分的呢?

定理 1.2.1 (**LU 分解定理**)如果 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式 $\Delta_k \neq 0\ (k=1,2,\cdots,n)$,即 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 都可逆,则存在唯一的单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与唯一的非奇异上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$.

证明:我们对 k 使用数学归纳法来证明每个 $\boldsymbol{A}_k$ 都有 LU 分解.

当 $k=1$ 时,由于 $\boldsymbol{A}_1=(a_{11})$ 可逆,因此 $\boldsymbol{L}_1=(1)$,$\boldsymbol{U}_1=(a_{11})$.

设 $\boldsymbol{A}_k$ 具有 LU 分解 $\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k$. 由于 $\boldsymbol{A}_k$ 可逆,故 $|\boldsymbol{A}_k|=|\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k|=|\boldsymbol{L}_k||\boldsymbol{U}_k|\neq 0$,从而 $\boldsymbol{L}_k$ 和 $\boldsymbol{U}_k$ 都是可逆的,并且 $\boldsymbol{A}_k^{-1}=\boldsymbol{U}_k^{-1}\boldsymbol{L}_k^{-1}$. 这样 $\boldsymbol{A}_{k+1}$ 就有下列分解:

$$\boldsymbol{A}_{k+1}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} & a_{k+1,k+1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{L}_k & \\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_k^{-1} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_k & \boldsymbol{L}_k^{-1}\boldsymbol{\alpha}\\ & a_{k+1,k+1}-\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_k^{-1}\boldsymbol{\alpha}\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{L}_{k+1}\boldsymbol{U}_{k+1} \quad (1.2.5)$$

其中,$\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 分别是 $\boldsymbol{A}_{k+1}$ 的第 $k+1$ 列和第 $k+1$ 行的前 k 个元素构成的 k 维列向量.

根据归纳假设,$\boldsymbol{L}_k$ 是单位下三角矩阵,$\boldsymbol{U}_k$ 是上三角矩阵,因此 $\boldsymbol{L}_{k+1}$ 是单位下三角矩阵,$\boldsymbol{U}_{k+1}$ 是上三角矩阵,这样式(1.2.5)就是 $\boldsymbol{A}_{k+1}$ 的 LU 分解. 另外,注意到 $|\boldsymbol{L}_{k+1}|=1$ 及 $\boldsymbol{A}_{k+1}$ 可逆,故

$$|\boldsymbol{U}_{k+1}|=|\boldsymbol{L}_{k+1}||\boldsymbol{U}_{k+1}|=|\boldsymbol{L}_{k+1}\boldsymbol{U}_{k+1}|=|\boldsymbol{A}_{k+1}|\neq 0$$

因此 $\boldsymbol{U}_{k+1}$ 也是可逆的,且其对角元 $a_{k+1,k+1}-\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_k^{-1}\boldsymbol{\alpha}\neq 0$.

由数学归纳法,$\boldsymbol{A}$ 的顺序主子矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 都具有 LU 分解,因此最大的顺序主子矩阵 $\boldsymbol{A}_n=\boldsymbol{A}$ 也具有 LU 分解.

下面用反证法证明 LU 分解的唯一性. 设 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$ 和 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}'\boldsymbol{U}'$ 都是 $\boldsymbol{A}$ 的 LU 分解,则由 $\boldsymbol{A}$ 可逆,可知 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{L}',\boldsymbol{U}'$ 都是可逆的,因此 $(\boldsymbol{L}')^{-1}\boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}'\boldsymbol{U}^{-1}$. 由于单位下三角矩阵的乘积和逆矩阵仍然都是单位下三角矩阵,上三角矩阵的乘积和逆矩阵仍然都是上三角矩阵,所以 $(\boldsymbol{L}')^{-1}\boldsymbol{L}$ 是单位下三角矩阵,$\boldsymbol{U}'\boldsymbol{U}^{-1}$ 是上三角矩阵,由于 $(\boldsymbol{L}')^{-1}\boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}'\boldsymbol{U}^{-1}$,因此只能有 $(\boldsymbol{L}')^{-1}\boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}'\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{I}$,此即 $\boldsymbol{L}'=\boldsymbol{L},\boldsymbol{U}'=\boldsymbol{U}$. 证毕.

如何计算矩阵的 LU 分解呢? 显然,如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 LU 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$,那么矩阵 $\boldsymbol{L}$ 可逆,即存在可逆矩阵 $\boldsymbol{L}_1$,使得 $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}=\boldsymbol{I}$,从而 $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{LU}=\boldsymbol{U}$,这也就意味着

$$\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I})=(\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A},\boldsymbol{L}_1)=(\boldsymbol{U},\boldsymbol{L}_1) \quad (1.2.6)$$

根据定理 1.1.2,这说明可通过对 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I})$ 做一系列行初等变换来求出 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{L}_1$,进而就可求出单位下三角阵 $\boldsymbol{L}_1$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{L}$.

定理 1.2.2 (**LDU 分解定理**)如果 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $\Delta_k\neq 0\ (k=1,2,\cdots,n)$,则存在唯一的单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$、唯一的单位上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 以及对角矩阵 $\boldsymbol{D}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDU}$.

画图可知,矩阵的 LDU 分解具有中心对称性,并能让我们领略到一种对称美.

例 1.2.2 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\ 3 & 1 & 0\\ -1 & -1 & -2\end{pmatrix}$ 的 LU 分解.

解: 由于 $\Delta_1 = 1, \Delta_2 = -5, \Delta_3 = 12$, 即各阶顺序主子式都不为零,根据 LU 分解定理可知,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有唯一的 LU 分解.

$$(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{I}) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -2 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 3 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -12/5 & 2/5 & 1/5 & 1 \end{array}\right) = (\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{L}_1)$$

从而 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1/5 & 1 \end{pmatrix}$, 故所求分解为

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1/5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -5 & 3 \\ 0 & 0 & -12/5 \end{pmatrix} = \boldsymbol{LU}$$

读者在前面应该已经注意到以下事实,即矩阵 $\boldsymbol{L}$ 的下三角部分的三个元素 3、-1 和 $-1/5$, 实际上就是将 $\boldsymbol{A}$ 变换成 $\boldsymbol{U}$ 的过程中所使用的三个乘子的相反数,并且元素的位置也与相应的行初等变换相对应. 这个事实在理论上也可以说明清楚,为此我们引入**基本矩阵** $\boldsymbol{E}_{ij}$ (fundamental matrix,即第 i 行第 j 列元素为 1、其余元素都为 0 的 $m \times n$ 矩阵,不要与初等矩阵混淆). 注意到

$$\boldsymbol{E}_{ij}\boldsymbol{E}_{kl} = \delta_{jk}\boldsymbol{E}_{il} \quad (1 \leqslant i \leqslant m, 1 \leqslant j, k \leqslant p, 1 \leqslant l \leqslant n) \tag{1.2.7}$$

其中, δ_{jk} 是克罗内克(Leopold Kronecker,1823—1891)记号:当 $j = k$ 时 $\delta_{jk} = 1$, 当 $j \neq k$ 时 $\delta_{jk} = 0$. 显然行初等矩阵

$$\boldsymbol{R}_{ij}(s) = \boldsymbol{I} + s\boldsymbol{E}_{ji}, \ \boldsymbol{R}_{ik}(t) = \boldsymbol{I} + t\boldsymbol{E}_{ki} \quad (1 \leqslant i, j, k \leqslant n)$$

因此,当 $i \neq k$ 时,有 $\boldsymbol{E}_{ji}\boldsymbol{E}_{ki} = \boldsymbol{O}$, 从而

$$\boldsymbol{R}_{ij}(s)\boldsymbol{R}_{ik}(t) = (\boldsymbol{I} + s\boldsymbol{E}_{ji})(\boldsymbol{I} + t\boldsymbol{E}_{ki}) = \boldsymbol{I} + s\boldsymbol{E}_{ji} + t\boldsymbol{E}_{ki} + st\boldsymbol{E}_{ji}\boldsymbol{E}_{ki} = \boldsymbol{I} + s\boldsymbol{E}_{ji} + t\boldsymbol{E}_{ki}$$

回到前面的例子,由式(1.2.1)易知

$$\boldsymbol{L} = [\boldsymbol{R}_{23}(1/5)\boldsymbol{R}_{13}(1)\boldsymbol{R}_{12}(-3)]^{-1} = \boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{13}(-1)\boldsymbol{R}_{23}(-1/5)$$

由于 $\boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{13}(-1) = \boldsymbol{I} + 3\boldsymbol{E}_{21} - \boldsymbol{E}_{31}$, 因此

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L} &= (\boldsymbol{I} + 3\boldsymbol{E}_{21} - \boldsymbol{E}_{31})\boldsymbol{R}_{23}(-1/5) = (\boldsymbol{I} + 3\boldsymbol{E}_{21} - \boldsymbol{E}_{31})(\boldsymbol{I} - \frac{1}{5}\boldsymbol{E}_{32}) \\ &= \boldsymbol{I} + 3\boldsymbol{E}_{21} - \boldsymbol{E}_{31} - \frac{1}{5}\boldsymbol{E}_{32} - \frac{3}{5}\boldsymbol{E}_{21}\boldsymbol{E}_{32} + \frac{1}{5}\boldsymbol{E}_{31}\boldsymbol{E}_{32} = \boldsymbol{I} + 3\boldsymbol{E}_{21} - \boldsymbol{E}_{31} - \frac{1}{5}\boldsymbol{E}_{32} \end{aligned}$$

这就解释了上述事实. 不过要提醒读者的是,用乘子来确定矩阵 $\boldsymbol{L}$, 虽然对一般情形也成立,但其理论分析却比较繁琐,有兴趣的读者请查阅文献[69].

LU 分解的发现,要归功于计算机科学之父、人工智能之父阿兰·图灵(Alan Tur-

ing,1812— 1954,见图 1-4). 2012 年是他 100 周年诞辰,被定为"阿兰·图灵年". 众所周知,他是计算机逻辑的奠基者,提出了"图灵机"和"图灵测试"等重要概念. 人们为纪念其在计算机领域的卓越贡献而专门设立了"图灵奖". 目前获此殊荣的华人仅有一人,即 2000 年的获奖者姚期智(Andrew Chi-Chih Yao). 1945 年,图灵提交了报告书《关于自动电子计算机(ACE)的数学设计说明书》(1972 年才被解密),最先用文字表述了存储程序控制的概念,并据此设计出计算机. 在随后的几年里,他致力于计算机程序理论的研究,并于 1948 年发表了"矩阵方法的舍入误差(Rounding-off errors in matrix processes)"一文,正式提出了 LU 分解. 这件史实也再次印证了计算机理论研究与矩阵计算的紧密关系.



图 1-4 图灵(1912—1954)

1.2.2 列选主元法

例 1.2.3 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3&1&0\\1&2&-1\\-1&-1&-2\end{pmatrix}$ 的 LU 分解.

分析:观察可知,只要对矩阵做一次第一类行初等变换 $\boldsymbol{r}_{12}$,即可将 $\boldsymbol{A}$ 变换成例 1.2.2 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$(这里记为 $\boldsymbol{A}_1$),即 $\boldsymbol{R}_{12}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{LU}$.

事实上,Matlab 提供了内置函数 lu,用于计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 LU 分解,其语法格式为

```
[L,U] = lu(A)
```

用 lu 来计算例 1.2.2,得到的 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{U}$ 如下:

```
L=
      1/3        1        0
      1          0        0
    - 1/3    - 2/5        1
U=
      3          1        0
      0          5/3    - 1
      0          0      - 12/5
```

显然上面的 $\boldsymbol{L}$ 不是单位下三角矩阵. 而用 lu 来计算例 1.2.3,却能得到 $\boldsymbol{A}$ 的 LU 分解如下:

```
L=
      1          0        0
      1/3        1        0
    - 1/3    - 2/5        1
U=
      3          1        0
      0          5/3    - 1
      0          0      - 12/5
```

这不禁让人想起《大话西游》中的"移魂大法",我们本想借力于神功,却不料弄巧成

拙,这让我们情何以堪？不过考虑到第一类行初等变换 $\boldsymbol{r}_{12}$ 具有对等性,而例 1.2.3 中的 $\boldsymbol{A}$ 却具有标准的 LU 分解,这启发我们正确的途径似乎应该是通过 $\boldsymbol{r}_{12}$，将例 1.2.2 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 反过来变成例 1.2.3 中的 $\boldsymbol{A}$. 更一般地,我们需要对这种思路进行深入研究. 为此,我们先引入“置换矩阵”的概念.

定义 1.2.2 每一行和每一列上正好有一个元素为 1,而其余元素都为 0 的方阵,称为**置换矩阵**或**排列矩阵**(permutation matrix).

例如,矩阵 $\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_3,\boldsymbol{e}_4,\boldsymbol{e}_2)$ 就是按序号 (1342) 重排四阶单位矩阵 $\boldsymbol{I}=(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3,\boldsymbol{e}_4)$ 的相关列后得到的排列矩阵,此时对四阶方阵 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_4)$，验算可知 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{AP}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_4,\boldsymbol{\alpha}_2)$，即按序号 (1342) 重排矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列即得矩阵 $\boldsymbol{B}$.

由于上述 $\boldsymbol{P}$ 也可通过按序号 (1423) 重排单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 的相关行来得到,我们自然猜想对矩阵 $\boldsymbol{A}$，左乘 $\boldsymbol{P}$ 的效果就是按序号 (1423) 重排 $\boldsymbol{A}$ 的行. 验算可知此言不谬.

特别地,对向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3,x_4)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^4$，计算可知 $\boldsymbol{Px}=(x_1,x_4,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$，即向量 $\boldsymbol{x}$ 的元素也按序号 (1423) 被重排.

关于置换矩阵,易知置换矩阵的乘积仍然是置换矩阵,并且第一类初等变换矩阵即对换矩阵显然是特殊的置换矩阵.

定义 1.2.3 如果存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$、单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足

$$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU} \tag{1.2.8}$$

则称式 (1.2.8) 为 $\boldsymbol{A}$ 的**带置换 $\boldsymbol{P}$ 的 LU 分解**,或矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 **PA=LU 分解**.

例 1.2.4 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&-1&2\\-2&2&1\\-3&1&3\end{pmatrix}$ 的 PA=LU 分解.

解: $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&-1&2\\-2&2&1\\-3&1&3\end{pmatrix}\underset{r_{13}(3)}{\overset{r_{12}(2)}{\sim}}\begin{pmatrix}1&-1&2\\0&0&5\\0&-2&9\end{pmatrix}\overset{r_{23}}{\sim}\begin{pmatrix}1&-1&2\\0&-2&9\\0&0&5\end{pmatrix}=\boldsymbol{U}$

显然,$\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{R}_{13}(3)\boldsymbol{R}_{12}(2)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}$. 注意到 $\boldsymbol{R}_{23}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_{22}-\boldsymbol{E}_{33}+\boldsymbol{E}_{23}+\boldsymbol{E}_{32}$，结合式 (1.2.7) 可知,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{R}_{13}(3)&=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_{22}-\boldsymbol{E}_{33}+\boldsymbol{E}_{23}+\boldsymbol{E}_{32})(\boldsymbol{I}+3\boldsymbol{E}_{31})=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_{22}-\boldsymbol{E}_{33}+\boldsymbol{E}_{23}+\boldsymbol{E}_{32}+3\boldsymbol{E}_{21}\\&=(\boldsymbol{I}+3\boldsymbol{E}_{21})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_{22}-\boldsymbol{E}_{33}+\boldsymbol{E}_{23}+\boldsymbol{E}_{32})=\boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{23}\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{R}_{12}(2)=\boldsymbol{R}_{13}(2)\boldsymbol{R}_{23}$$

因此,$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{R}_{13}(3)\boldsymbol{R}_{12}(2)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{R}_{12}(2)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{13}(2)\boldsymbol{R}_{23}\boldsymbol{A}$，从而

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}_{23}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{L}=(\boldsymbol{R}_{12}(3)\boldsymbol{R}_{13}(2))^{-1}=\boldsymbol{R}_{13}(-2)\boldsymbol{R}_{12}(-3)=\begin{pmatrix}1&0&0\\-3&1&0\\-2&0&1\end{pmatrix}$$

由于列初等变换可以转化为行初等变换,因此,更一般地,当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 仅为可逆方阵时,我们可以先通过某些置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 对 $\boldsymbol{A}$ 的行进行重排,然后就可以使用 LU 分解了.

定理 1.2.3　(列主元 LU 分解定理) 对 n 阶可逆方阵 $\boldsymbol{A}$，存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$、单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得 $\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$.

证明: 对 n 阶可逆方阵 $\boldsymbol{A}$，考察由其前 $n-1$ 列构成的 $n\times(n-1)$ 子矩阵，其 n 个 $n-1$ 阶子矩阵中必有一个是可逆的，否则将 $|\boldsymbol{A}|$ 按第 n 列拉普拉斯展开后，易知 $|\boldsymbol{A}|=0$，这与 $\boldsymbol{A}$ 可逆相矛盾. 通过置换矩阵 $\boldsymbol{P}_1$（显然 $\boldsymbol{P}_1$ 未必唯一，为什么?）将 $\boldsymbol{A}$ 中的这个可逆的 $n-1$ 阶子矩阵行置换到 $n-1$ 阶主子矩阵的位置，从而 $\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}$ 的 $n-1$ 阶主子矩阵是可逆的，即 $\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}$ 的第 $n-1$ 个顺序主子式 $\Delta_{n-1}\neq 0$. 同样，如果有必要，对 $\boldsymbol{A}_1$ 的前 $n-1$ 行，也可以通过置换矩阵 $\boldsymbol{P}_2$，将其中的可逆的 $n-2$ 阶子矩阵行置换到 $n-2$ 阶主子矩阵的位置，即 $\boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}$ 的第 $n-2$ 个顺序主子式 $\Delta_{n-2}\neq 0$. 继续这个过程，可得置换矩阵 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-2}\cdots\boldsymbol{P}_1$，使得 $\boldsymbol{PA}$ 的所有顺序主子矩阵式全部可逆，即 $\boldsymbol{PA}$ 具有 LU 分解. 证毕.

根据列主元 LU 分解定理，如果存在 $\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$，那么矩阵 $\boldsymbol{L}$ 可逆，即存在可逆矩阵 $\boldsymbol{L}_1$，使得 $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}=\boldsymbol{I}$，从而 $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{LU}=\boldsymbol{U}$，即

$$\boldsymbol{L}_1(\boldsymbol{PA},\boldsymbol{I})=(\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{PA},\boldsymbol{L}_1)=(\boldsymbol{U},\boldsymbol{L}_1)$$

这也就意味着可通过对 $(\boldsymbol{PA},\boldsymbol{I})$ 做行初等变换先求出 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{L}_1$，进而再求出 $\boldsymbol{L}$.

例 1.2.5　能否求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{pmatrix}$ 的 LU 分解?

分析: 注意这里 $\Delta_1=1,\Delta_2=0,\Delta_3=-1$，即 $\Delta_2=0$ 不满足定理 1.2.1 的条件，但矩阵 $\boldsymbol{A}$ 却满足定理 1.2.3 的条件，因此只能求 $\boldsymbol{A}$ 的带置换 $\boldsymbol{P}$ 的 LU 分解.

解: 由于 $\boldsymbol{A}$ 的前 2 列中的三个 2 阶子矩阵中，$\begin{pmatrix}1&2\\3&5\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}2&4\\3&5\end{pmatrix}$ 都可逆，因此 $\boldsymbol{P}_1$ 可取 $\boldsymbol{R}_{13}$ 或 $\boldsymbol{R}_{23}$，这里我们取 $\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{R}_{13}$.（为什么没取 $\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{R}_{23}$?）类似地，可知 $\boldsymbol{P}_2=\boldsymbol{I}$. 因此 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{R}_{13}$.

$$(\boldsymbol{PA},\boldsymbol{I})=\begin{pmatrix}3&5&6&1&0&0\\2&4&5&0&1&0\\1&2&3&0&0&1\end{pmatrix}\overset{r_{12}(-2/3)}{\underset{r_{13}(-1/3)}{\sim}}\begin{pmatrix}3&5&6&1&0&0\\0&2/3&1&-2/3&1&0\\0&1/3&1&-1/3&0&1\end{pmatrix}$$

$$\overset{r_{23}(-1/2)}{\sim}\begin{pmatrix}3&5&6&1&0&0\\0&2/3&1&-2/3&1&0\\0&0&1/2&0&-1/2&1\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{U}\ \vdots\ \boldsymbol{L}_1)$$

从而 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0\\2/3&1&0\\1/3&1/2&1\end{pmatrix}$，于是所求的 PA=LU 分解为

$$\boldsymbol{PA}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\2/3&1&0\\1/3&1/2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&5&6\\0&2/3&1\\0&0&1/2\end{pmatrix}=\boldsymbol{LU}\quad(1.2.9)$$

对 $\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$ 两边求行列式，并注意到 $|\boldsymbol{P}|=\pm1$，$|\boldsymbol{L}|=1$，因此

$$\pm|\boldsymbol{A}|=|\boldsymbol{P}|\,|\boldsymbol{A}|=|\boldsymbol{PA}|=|\boldsymbol{LU}|=|\boldsymbol{L}|\,|\boldsymbol{U}|=|\boldsymbol{U}|$$

此即 $|\boldsymbol{A}|=\pm|\boldsymbol{U}|=\pm u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$，这说明可通过计算 $\boldsymbol{U}$ 的对角元之积即主元之积 $u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$ 来计算 A 的行列式. 分析表明，这种方法的时间复杂度为 $O(n^3)$，远远小于使用拉普拉斯展开定理所耗费的 $O(n!)$. 事实上，Matlab 计算行列式的内置函数 det 就是基于 LU 原理来实现的.

当系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，显然存在置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得 $\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$，从而线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 就变成了 $\boldsymbol{PAx}=\boldsymbol{LUx}=\boldsymbol{L}(\boldsymbol{Ux})=\boldsymbol{Pb}$，这说明此时我们也可以通过求解两个特殊的三角方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{Pb}$，$\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$ 来求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$.

例 1.2.6　**(小主元带来的误差危害)** 考虑线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，这里 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，其理论解为 $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}$. 如果系数矩阵被**扰动**成 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=\begin{pmatrix}10^{-20}&1\\1&1\end{pmatrix}$，手算可知它的

$$\widetilde{\boldsymbol{L}}=\begin{bmatrix}1&0\\10^{20}&1\end{bmatrix},\widetilde{\boldsymbol{U}}=\begin{bmatrix}10^{-20}&1\\0&1-10^{20}\end{bmatrix}$$

假设机器精度为 $\varepsilon=10^{-16}$，根据浮点运算的规则，即**两数相加时，大数"吃掉"小数**(请参阅 1.3 节)，则在 $\widetilde{\boldsymbol{U}}$ 中的元素 $1-10^{20}$ 中，大数 10^{20}"吃掉"了小数 1，因此产生的浮点矩阵为 $\boldsymbol{A}'=\widetilde{\boldsymbol{A}}$，$\boldsymbol{L}'=\widetilde{\boldsymbol{L}}$，$\boldsymbol{U}'=\begin{bmatrix}10^{-20}&1\\0&-10^{20}\end{bmatrix}$. 虽然对于接近 $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}'$(这里 $\boldsymbol{A}'=\widetilde{\boldsymbol{A}}$)，它的 LU 因子 $\boldsymbol{L}'$、$\boldsymbol{U}'$ 非常接近理论上的因子 $\widetilde{\boldsymbol{L}}$、$\widetilde{\boldsymbol{U}}$，即 LU 分解是稳定的. 但显然此时 $\boldsymbol{L}'\boldsymbol{U}'=\begin{pmatrix}10^{-20}&1\\1&0\end{pmatrix}$ 与 $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ 明显不同，因为在(2,2)位置上，$\widetilde{\boldsymbol{A}}$ 中的 1 变成了 $\boldsymbol{L}'\boldsymbol{U}'$ 中的 0. 现在 $\boldsymbol{L}'\boldsymbol{U}'\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的理论解 $\boldsymbol{x}'=(0,1)^{\mathrm{T}}$，显然不等于前面的理论解 $\boldsymbol{x}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$，而且 $\boldsymbol{x}'$ 明显不接近 $\boldsymbol{x}$，这说明将 LU 分解用到解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 上时是不稳定的. 究其原因，是因为 $\widetilde{\boldsymbol{U}}$ 中的第一个主元 10^{-20} 太小，导致第二个主元中 1 与 10^{20} 的值相差悬殊，出现了"大数吃小数"的情况.

如果 $\boldsymbol{b}$ 也被扰动成 $\widetilde{\boldsymbol{b}}=(1,10^{-20})^{\mathrm{T}}$，则此时扰动方程组为 $\widetilde{\boldsymbol{A}}\widetilde{\boldsymbol{x}}=\widetilde{\boldsymbol{b}}$，即

$$\begin{bmatrix}10^{-20}&1\\1&1\end{bmatrix}\widetilde{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}1\\10^{-20}\end{bmatrix}\tag{1.2.10}$$

经计算易知其理论解为 $\widetilde{\boldsymbol{x}}=(-1,1+10^{-20})^{\mathrm{T}}$，与扰动前的理论解 $\boldsymbol{x}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$ 非常接近. 然而按高斯消元法，则有

$$(\widetilde{\boldsymbol{A}},\widetilde{\boldsymbol{b}})=\begin{bmatrix}10^{-20}&1&1\\1&1&10^{-20}\end{bmatrix}\overset{r_{12}(-10^{20})}{\sim}\begin{bmatrix}10^{-20}&1&1\\0&1-10^{20}&10^{-20}-10^{20}\end{bmatrix}$$

在浮点运算中，后者变成了 $\begin{bmatrix}10^{-20}&1&1\\0&-10^{20}&-10^{20}\end{bmatrix}$，因此数值解为 $x_2=1$，$x_1=0$，显然 x_1 的数值解 0 与扰动前的理论解 -1 的误差也非常大. 这恰似著名的"蝴蝶效应"：蝴

蝶仅仅拍动了一下翅膀，却导致万里之外的一场飓风. 其罪魁祸首，仍然是第一个主元 10^{-20} 太小，导致第二个主元 $1-10^{20}$ 中 1 与 10^{20} 的值相差悬殊.

如何避免上述危害呢？联想到前面的置换技巧，我们在消去的过程中，可以通过适当的选主元技术，以避免放大数据误差. 常用的选主元技术就是**列选主元法**：

对 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$，在确定第 k 个主元 $a_{kj_k}^{(k)}$（$j_k\geqslant k$）时，先从该列自主元位置 (k,j_k) 至列尾的所有元素 $a_{kj_k}^{(k)},\cdots,a_{nj_k}^{(k)}$ 中选择绝对值最大的元素，与 $a_{kj_k}^{(k)}$ 交换，然后将 $a_{k+1,j_k}^{(k)},\cdots,a_{nj_k}^{(k)}$ 化为零. 继续这个过程，直至将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化成其行阶梯形 $\boldsymbol{H}_A$.

特别地，对可逆方阵 $\boldsymbol{A}$，最后得到的是上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$. 另外，列选主元法可保证消去时的乘子都不超过 1，这明显抑制了数据误差的放大和传播.

由定理 1.1.2 可知，对 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 及其行阶梯形 $\boldsymbol{H}_A$，列选主元法意味着存在 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}'$，使得 $\boldsymbol{R}'\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}_A$，即存在 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}$（这里 $\boldsymbol{R}=(\boldsymbol{R}')^{-1}$），使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{H}_A$. 将 $\boldsymbol{H}_A$ 及 $\boldsymbol{R}$ 分别分块为 $\boldsymbol{H}_A=\begin{pmatrix}\boldsymbol{G}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{R}=(\boldsymbol{F},\boldsymbol{F}')$，其中 $\boldsymbol{G}$ 为 $r\times n$ 阶行满秩矩阵，$\boldsymbol{F}$ 为 $m\times r$ 阶列满秩矩阵，即 $r(\boldsymbol{F})=r(\boldsymbol{G})=r$，这里 $r=r(\boldsymbol{A})$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩，则

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{H}_A=(\boldsymbol{F},\boldsymbol{F}')\begin{pmatrix}\boldsymbol{G}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{G}+\boldsymbol{F}'\boldsymbol{O}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{G} \tag{1.2.11}$$

式 (1.2.11) 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**满秩分解**(full rank decomposition)，即任意矩阵可分解为列满秩矩阵与行满秩矩阵的乘积.

例 1.2.7　用列选主元法重解例 1.2.3.

解：列选主元法.

$$(\boldsymbol{A}\,\vdots\,\boldsymbol{I})=\left(\begin{array}{ccc:ccc}3&1&0&1&0&0\\1&2&-1&0&1&0\\-1&-1&-2&0&0&1\end{array}\right)\overset{r_{12}(-1/3)}{\underset{r_{13}(1/3)}{\sim}}\left(\begin{array}{ccc:ccc}3&1&0&1&0&0\\0&5/3&-1&-1/3&1&0\\0&-2/3&-2&1/3&0&1\end{array}\right)$$

$$\overset{r_{23}(2/5)}{\sim}\left(\begin{array}{ccc:ccc}3&1&0&1&0&0\\0&5/3&-1&-1/3&1&0\\0&0&-12/5&1/5&2/5&1\end{array}\right)\equiv(\boldsymbol{U}\,\vdots\,\boldsymbol{L}_1)$$

因此 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1{}^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0\\1/3&1&0\\-1/3&-2/5&1\end{pmatrix}$，故所求分解为

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3&1&0\\1&2&-1\\-1&-1&-2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\1/3&1&0\\-1/3&-2/5&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&1&0\\0&5/3&-1\\0&0&-12/5\end{pmatrix}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

显然，手算结果与本小节开始处的机算结果完全一致，这说明 Matlab 内置函数 lu 分解的实现算法就是基于列选主元法. 在文献[110]中，Matlab 的创始人之一的莫勒

(Cleve Barry Moler)提供了 lutx 函数,即 lu 函数的可阅读版本,从中我们不难发现这个事实:

```
function [L,U,p] = lutx(A)
% [L,U,p] = lutx(A)产生单位下三角矩阵 L,上三角矩阵 U,以及排列向量 p,使得 L * U = A(p,:).
[n,n] = size(A);p = (1:n)'
for k = 1:n- 1
%查找第 k 列中自对角元至列尾的元素中绝对值最大的元素
[r,m] = max(abs(A(k:n,k))); m = m+ k- 1;
% 跳过主元为零的列
if (A(m,k) ~ = 0)
    %将主元所在的行换至第 k 行
    if (m ~= k)
      A([k m],:) = A([m k],:);p([k m]) = p([m k]);
    end
    %计算乘子
    i = k+ 1:n; A(i,k) = A(i,k)/A(k,k);
    % 更新矩阵的剩余部分
    j = k+ 1:n; A(i,j) = A(i,j) - A(i,k)* A(k,j); %占用运算时间最多的语句
  end
end
%分离出结果 L 和 U
L = tril(A,- 1) + eye(n,n);U = triu(A);
```

Matlab 中还提供了调用格式(注意返回的矩阵的顺序):

```
[L,U,P]= lu(A);
```

用来计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 带置换 $\boldsymbol{P}$ 的 PA=LU 分解. 对例 1. 2. 5 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$, 机算可知结果与手算一致.

用列选主元法解扰动方程组 (1. 2. 10), 可知

$$\boldsymbol{P}(\widetilde{\boldsymbol{A}},\widetilde{\boldsymbol{b}}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 10^{-20} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 10^{-20} \\ 10^{-20} & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\overset{r_{12}(-10^{-20})}{\sim} \begin{pmatrix} 10^{-20} & 1 & 10^{-20} \\ 0 & 1-10^{-20} & 1-10^{-40} \end{pmatrix}$$

从而易知其解为 $\widetilde{\boldsymbol{x}} = (-1,1+10^{-20})^{\mathrm{T}}$.

其他的选主元技术还有全选主元技术、对角选主元技术、随机选主元技术等. 下面我们用全选主元技术证明矩阵标准型定理,其余的请读者查阅文献[58,62,63,90].

定理 1. 2. 4　**(矩阵标准型定理)**任意 $m \times n$ 阶任意矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过有限次初等变换,必能化成如下形式的**标准型**(normal form) $\boldsymbol{N}_A$:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}_{r,n-r} \\ \boldsymbol{O}_{m-r,r} & \boldsymbol{O}_{n-r,n-r} \end{pmatrix}_{m\times n}$$

其中，$r = r(\boldsymbol{A})$. 另外，当 $r = 0$ 时，我们约定 $\boldsymbol{I}_0$ 为零矩阵.

证明：我们的证明实际上就是全选主元法.

设 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m\times n}$，若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$，则 $\boldsymbol{N}_A = \boldsymbol{O}$，结论成立.

若 $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{O}$，如果 a_{11} 不是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 绝对值最大的元素，而是其他元素（例如 a_{34}），则可以通过一次行交换变换和一次列交换变换将之换到第一行第一列（例如 r_{13} 和 c_{14}）. 因此不失一般性，设 a_{11} 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 绝对值最大的元素. 显然此时 $a_{11} \neq 0$.

接下来，先对第一列的其余元素执行倍加变换，即 $r_{1i}\left(-\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}\right)$ $(i = 2,3,\cdots,m)$；再对第一行的其余元素执行倍加变换，即 $c_{1j}\left(-\dfrac{a_{1j}}{a_{11}}\right)$ $(j = 2,3,\cdots,n)$；然后对第一行执行数乘变换，即 $r_1\left(\dfrac{1}{a_{11}}\right)$. 显然，经过这一系列变换后，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 就变成了如下的形式：

$$\begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{O}_{1,n-1} \\ \boldsymbol{O}_{m-1,1} & \boldsymbol{A}_1 \end{pmatrix}_{m\times n}$$

其中，$\boldsymbol{A}_1$ 是 $(m-1)\times(n-1)$ 阶矩阵.

对 $\boldsymbol{A}_1$ 重复上述讨论. 由于 m,n 都是有限数，因此必定存在某个非负整数 r，使得相应的矩阵 $(m-r)\times(n-r)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_r$ 是零矩阵. 证毕.

由矩阵标准型定理及式 (1.1.4) 可知，存在 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}'$ 及 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{C}'$，使得 $\boldsymbol{R}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}' = \boldsymbol{N}_A$，即存在 m 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}$（这里 $\boldsymbol{R} = (\boldsymbol{R}')^{-1}$）及 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{C}$（这里 $\boldsymbol{C} = (\boldsymbol{C}')^{-1}$），使得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有如下**标准型分解**（canonical decomposition）：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{N}_A C \tag{1.2.12}$$

对于任意方阵，甚至长方阵，有的没有 LU 分解，有的却有无穷多种 LU 分解，比如

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 1-2a \end{pmatrix}$$

其中，a 为任意实数. 可见并非都是"此事不宜撸(LU)".

因为 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 总能通过列选主元法化成行阶梯矩阵，因此形式上总能保证 $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$，当 $m \geqslant n$ 时，$\boldsymbol{L}$ 也是 $m\times n$ 阶矩阵，而 $\boldsymbol{U}$ 是 n 阶方阵；当 $m < n$ 时，$\boldsymbol{L}$ 是 m 阶方阵，而 $\boldsymbol{U}$ 则是 $m\times n$ 阶矩阵. 例如

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2/3 & 1 \\ 1/3 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 5 \\ 0 & 2/3 \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix}(3)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 5 & 6 \\ 0 & 1/3 & 1 \end{pmatrix},\quad (1)(3\quad 5\quad 6) = (1)(3\quad 5\quad 6)$$

上述分解显然可看成分解式(1.2.9)的**约化**(reduced)形式[1]，而且适当扩充后，可变成方阵的情形. 例如

$$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&0\\2&4&0\\3&5&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\2/3&1&0\\1/3&1/2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&5&1\\0&2/3&-2/3\\0&0&0\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\2/3&1&0\\1/3&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&0&1\\0&1&-2/3\\0&0&-1/3\end{pmatrix}$$

例 1.2.8　验证分块矩阵的下列 LDU 分解：

(1)主子矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，成立

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}&\boldsymbol{B}\\\boldsymbol{C}&\boldsymbol{D}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}&\boldsymbol{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}\end{pmatrix}\tag{1.2.13}$$

(2)右下角的子矩阵 $\boldsymbol{D}$ 可逆时，成立

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}&\boldsymbol{B}\\\boldsymbol{C}&\boldsymbol{D}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{D}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}&\boldsymbol{I}\end{pmatrix}\tag{1.2.14}$$

在式(1.2.13)中，我们称矩阵 $\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 补(Schur complement)，而在式(1.2.14)中，我们称矩阵 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}$ 为矩阵 $\boldsymbol{D}$ 的 Schur 补. Schur 补在矩阵理论、统计分析、矩阵计算、线性方程组求解、线性系统、控制理论等领域都有着广泛的应用.

1.2.3　特殊矩阵的 LU 分解

特殊矩阵在矩阵分析与计算中扮演着重要的角色，甚至可以说，具有各种特殊性的矩阵构成了这个领域的血与肉. 从大的方面讲，特殊矩阵可分为特性矩阵和特型矩阵两大类(这两类可以有交集). 前者通过具有不易直观识别的性质来刻画，典型的有可逆矩阵、正交矩阵、正定矩阵、幂等矩阵($\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$)等；后者则可以通过非常容易识别的结构或模式来刻画，比如三角矩阵、置换矩阵、对称矩阵、带状矩阵等. 这里我们将把笔墨集中在实对称正定矩阵和带状矩阵的 LU 分解上.

我们知道，实对称正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 在存储上可节约大约一半的空间，那么在求解以这样的 $\boldsymbol{A}$ 为系数矩阵的线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 时，是否也能利用 $\boldsymbol{A}$ 的这种特殊结构减少计算量呢?

当 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶实对称正定矩阵时，其所有顺序主子式 $\Delta_k>0\ (k=1,2,\cdots,n)$. 因此，根据定理 1.2.2，存在单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$、单位上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和对角矩阵 $\boldsymbol{D}$，使得

---

[1] "约化"的概念，在 3.2 节的 QR 分解以及 4.5 节中的 SVD 分解中还会涉及.

$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDU}$，从而 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$，这里 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$ 是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 是单位上三角矩阵. 因为 $A=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$，故 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDU}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$. 由 $\boldsymbol{LDU}$ 分解的唯一性，可知必有 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$，此时显然有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}$. 进一步可知，因为 $\boldsymbol{A}$ 为实对称正定矩阵，因此对角矩阵 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$ 的对角元都为正数。若记 $\sqrt{\boldsymbol{D}}=\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}=\mathrm{diag}(\sqrt{d_1},\sqrt{d_2},\cdots,\sqrt{d_n})$，则有

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LD}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{D}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{LD}^{\frac{1}{2}})(\boldsymbol{LD}^{\frac{1}{2}})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_1{}^{\mathrm{T}}$$

其中，$\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{LD}^{\frac{1}{2}}$ 是可逆的下三角矩阵.

定理 1.2.4　(Cholesky 分解定理) 设 $\boldsymbol{A}$ 是实对称正定矩阵，则存在唯一的可逆下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$，使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}} \tag{1.2.15}$$

式 (1.2.15) 就是实对称正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 **Cholesky 分解**，也常写成 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$ 或 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}$ 的形式，其中的 $\boldsymbol{G}$、$\boldsymbol{R}$ 都为可逆的上三角矩阵.

有了 Cholesky 分解后，对称正定线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 即对称正定系统的计算就可以转化为求解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，即求解两个三角方程组 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$. 这要求我们先对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 做 LU 分解，再求出对角矩阵 $\boldsymbol{D}$ 和 Cholesky 分解因子 $\boldsymbol{L}$. 遗憾的是，分析表明，这种方法并未利用矩阵的对称性来减小运算量. 事实上，下面介绍的平方根法更有效.

考虑矩阵的具体元素，将式 (1.2.15) 写成如下形式：

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}=\boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}$$

利用矩阵乘法规则，可以依次计算出 $l_{ij}\ (i\geqslant j)$，具体步骤如下：

(1)由 $a_{11}=l_{11}^2$ 可知 $l_{11}=\sqrt{a_{11}}$，进而由 $a_{i1}=l_{i1}l_{11}\ (i\geqslant 2)$可知 $l_{i1}=a_{i1}/l_{11}$；

(2)当 $l_{j1},l_{j2},\cdots,l_{j,j-1}$ 已求出时，由 $a_{jj}=l_{j1}^2+l_{j2}^2+\cdots+l_{jj}^2=\sum\limits_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2+l_{jj}^2$ 可知 $l_{jj}=\sqrt{a_{jj}-\sum\limits_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2}$；

(3)当 $i>j$ 时，由 $a_{ij}=\sum\limits_{k=1}^{j}l_{ik}l_{jk}=\sum\limits_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}+l_{ij}l_{jj}$ 可知 $l_{ij}=(a_{ij}-\sum\limits_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk})/l_{jj}$.

例 1.2.9　解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} 6 \\ -0.5 \\ 1.25 \end{pmatrix}$.

分析： 按平方根法可知，l_{ij} 的计算顺序应该为：$l_{11}\to l_{21}\to l_{31}\to l_{22}\to l_{32}\to l_{33}$.

解： 由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$，且 $\Delta_1=4>0$，$\Delta_2=16>0$，$\Delta_3=|\boldsymbol{A}|=16>0$，因此 $\boldsymbol{A}$ 对称正定，即 $\boldsymbol{A}$ 存在Cholesky分解.

$$l_{11}=\sqrt{4}=2,\ l_{21}=\frac{-1}{2}=-0.5,\ l_{31}=\frac{1}{2}=0.5,\ l_{22}=\sqrt{4.25-(-0.5)^2}=2$$

$$l_{32}=\frac{2.75-0.5\times(-0.5)}{2}=1.5,\ l_{33}=\sqrt{3.5-(0.5)^2-(1.5)^2}=1$$

即

$$L=\begin{pmatrix}2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1\end{pmatrix}$$

继续求解 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$ 得 $\boldsymbol{y}=(3,0.5,-1)^{\mathrm{T}}$，再由 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 可知 $\boldsymbol{x}=(2,1,-1)^{\mathrm{T}}$.

由于 $a_{jj}=\sum_{k=1}^{j}l_{jk}^2\ (j=1,2,\cdots,n)$，而 $l_{ij}>0$，因此 $\max_{1\leqslant j\leqslant n,1\leqslant k\leqslant j}|l_{jk}|\leqslant\max_{1\leqslant j\leqslant n}\sqrt{a_{jj}}$，这说明分解过程中矩阵 L 中的元素 l_{jk} 的数量级不增长，因此平方根法是数值稳定的. 另外，平方根法显然不必选主元. 但即便如此，平方根法仍有改进空间，因为其中用到了开方运算. 事实上，根据分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}$，有 $\boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，因此可先解 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$，再解 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{y}$. 这种方法显然就避免了平方运算. 可以证明，这种改进的平方根法适用于任意对称矩阵（未必正定），除非出现主元为零的情况.

在 Matlab 中，提供了内置函数 chol 用于计算 $\boldsymbol{A}$ 的 Cholesky 分解，具体格式为

```
L= chol(A,'lower')  或  R= chol(A)
```



图 1-5　楚列斯基(1875—1918)

楚列斯基（Andre-Louis Cholesky，1875 — 1918，见图 1-5）年轻时曾就读于巴黎综合理工学院[①]，受到卡米尔・约当（详见 2.5.4 小节）、亨利・贝克勒（Henri Becquerel，1852—1908，因发现放射性获得 1903 年诺贝尔物理学奖）等大师的熏陶，入伍后在军队的测绘工作中显露出敏锐的智力和显著的数学才能. 20 世纪初，随着巴黎子午线的修改，迫切需要对法国重新进行三角剖分. 为了求解用最小二乘法拟合数据时产生的法方程，他提出了后来以他的名字命名的方法. 他死后，他的一位同事在 1924 年以 Cholesky 的名义在《测地学快报》（*Bulletin géodesique*）上发表了这个方法，但未引起重视. 二战中，杰克・托德（Jack Todd，即 John Todd，数值分析与计算领域的先锋性人物，《数值数学基础》的作者）在伦敦国王学院将之引入分析课程之中. 1948 年，福克斯（Leslie Fox，1918—1992，英国 IMA 协会设有以他命名的莱斯利・福克斯数值分析奖）、赫斯基（Harry Douglas Huskey，1982 年计算机先驱奖获得者，ENIAC 研制组骨干成员之一）、威尔金森（James Hardy Wilkinson，1919—1986）合作出"关于代数线性联立方程的解的一些注记（notes on the solution of algebraic linear simultaneous equations）"一文，分析了这个方法，同年，图灵在"矩阵方法中的舍入误差"中研究了这个方法的稳定性.

① 这是一所军事院校，该校的别名"X"表示未知数 x，意味着数学在该校的地位很重要.

例 1.2.10　（**热传导问题**）热量从系统的一部分传到另一部分或由一个系统传到另一个系统的现象叫**热传导**. 对于热传导问题，重要的是确定稳定状态下的温度分布场. 对于截面（如图 1-6 所示）为矩形薄片的导热铁杆，假设四周温度已知（上、下、左、右的温度分别为 0°、10°、5° 和 20°），则其截面在稳定状态下的温度分布函数 $u(x,y)$ 满足**拉普拉斯方程**

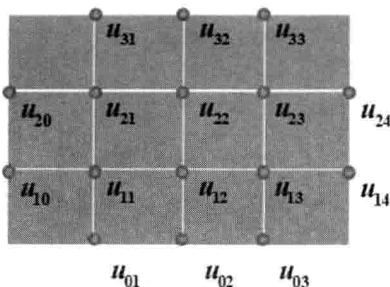


图 1-6　网格点选取方案（自然排序法）

$$\Delta u \equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \tag{1.2.16}$$

其中 $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ 称为**拉普拉斯**（Pierre-Simon Laplace，1749—1827）**算子**，许多像拉普拉斯方程这样的偏微分方程没有或难以求出解析解，因此更合理的希望是求出其数值解. 通过在水平方向和垂直方向分别作两族步长为 h 的平行线，然后采用数值解法计算出**网格点**的温度近似值，就可以得到拉普拉斯方程的数值解. 首先，利用泰勒（Brook Taylor，1685—1731）公式可以证明

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2}[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)] \tag{1.2.17}$$

这是因为 $f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{1}{2!}f''(x)h^2 + o(h^2)$，从而有

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + f''(x)h^2 + o(h^2)$$

略去高阶无穷小 $o(h^2)$，并稍加整理，即可得出式 (1.2.17).

将式 (1.2.17) 分别应用到二阶偏导数 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x_i,y_j)$ 和 $\frac{\partial^2}{\partial y^2}u(x_i,y_j)$，并记 $u(x_i,y_j) = u_{ij}$，则

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_{ij} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}),\quad \frac{\partial^2}{\partial y^2}u_{ij} \approx \frac{1}{h^2}(u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1})$$

将上式代入拉普拉斯方程 (1.2.16)，即得“＋型”**五点差分格式**：

$$\frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} + u_{i,j-1} - 4u_{ij} + u_{i,j+1} + u_{i+1,j}) = 0$$

这样，拉普拉斯方程 (1.2.16) 就变成了线性方程组：

$$u_{i-1,j} + u_{i,j-1} - 4u_{ij} + u_{i,j+1} + u_{i+1,j} = 0 \quad (i=1,2;j=1,2,3) \tag{1.2.18}$$

并且 $u_{01} = u_{02} = u_{03} = 10°, u_{14} = u_{24} = 20°, u_{31} = u_{32} = u_{33} = 0°, u_{10} = u_{20} = 5°$.

令 $\boldsymbol{u} = (u_{11},u_{12},u_{13},u_{21},u_{22},u_{23})^{\mathrm{T}}$，$b = (15,10,30,5,0,20)^{\mathrm{T}}$，则方程组 (1.2.18) 变形为

$$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{b} \tag{1.2.19}$$

其系数矩阵 $A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ 是带宽为 7 的带状矩阵.

定义 1.2.4　对于 n 阶方阵 $A = (a_{ij})$，若当 $|i-j| > l$ 时 $a_{ij} = 0$，且至少有一个 k 值，使得 $a_{k,k-l} \neq 0$ 或 $a_{k,k+l} \neq 0$ 成立，则称矩阵 A 为**带状矩阵**(band matrix)，$2l+1$ 为其**带宽**(bandwidth)，l 为其**半带宽**(half bandwidth)，并且称其对角线为第 0 条对角线，往上依次是第 1 条，第 2 条，…，第 l 条对角线，往下则依次是第 -1 条，第 -2 条，…，第 $-l$ 条对角线.

显然，对角矩阵是最特殊的带状矩阵，带宽为 1. 另外，带宽为 3 的三对角矩阵也很常见. 一般地，我们希望带状矩阵的带宽远远小于其阶数.

Matlab 中提供了语法

```
A= diag(v,k)
```

来生成 $N+|k|$ 阶的方阵 A，其中向量 v 的维数为 N，其元素依次构成 A 的第 k 条对角线上的元素. 当 $k = 0$ 时可使用缺省形式的语法

```
A= diag(v)
```

这样方程组 (1.2.17) 的系数矩阵 A 就可以用下列代码段来生成：

```
v= 4* ones(1,6);i= 1:1:5;v1= (- 1)* (rem(i,3)~ = 0);v2= (- 1)* ones(1,3);
A= diag(v2,- 3)+ diag(v1,- 1)+ diag(v)+ diag(v1,1)+ diag(v2,3)
```

因为带状矩阵结构的特殊性，我们自然希望运算过程中能保持这种结构，即**保结构**. 但使用 inv(A) 机算可知，A 的逆矩阵 A^{-1} 不再是带状矩阵(虽然 A^{-1} 可看成带宽为 11 的带状矩阵，但这显然毫无意义)，实际上 A^{-1} 中没有一个零元素，这显然增加了存储空间，说明用矩阵求逆法解方程组 (1.2.19)，不是一种保结构的算法. 可是对 A 使用 LU 分解，我们却惊喜连连，因为算出的 L 和 U 不仅是三角矩阵，而且仍然是带宽矩阵，带宽为 4(我们称之为**半带宽矩阵**). 使用 LU 分解解方程组 (1.2.19) 的代码段如下：

```
[L,U]= lu(A);  u= U\(L\b)
```

最终机算出的结果为 $u = (7.0186, 8.6646, 12.0186, 4.4099, 5.6211, 9.4099)^{T}$. 这些结果，加上已知的四周温度，就构成了温度分布函数 $u(x,y)$ 在相应网格点温度的近似值. 我们可以借助于下列 Matlab 代码绘出其图形：

```
u= reshape(u,2,3)  %把一维数组 u 变形为(2 * 3)二维数组 u
up= [0 0 0];down= [10 10 10];u= [up; u;down] %加入上下的初始数据
%加入左右的初始数据,角点的温度取平均数
left= [2.5;5; 5;12.5];right= [10;20;20;15];u= [left u right]
x= - 1:4;y= - 1:3;mesh(u,'LineWidth',3) %线宽设为 3
```

结果如图 1－7 所示. 显然图中的图形非常不光滑,这是因为网格点取得太少. 有兴趣的读者请适当增加网格点数后,再重绘温度分布场 $u(x,y)$.

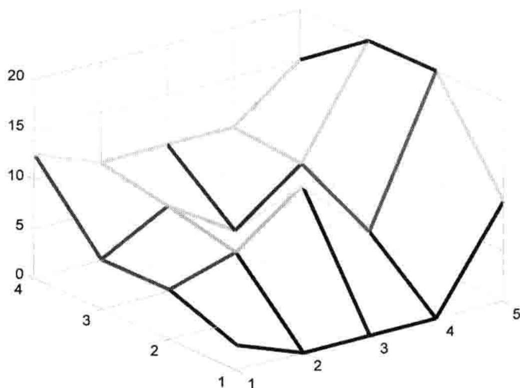


图 1－7　温度场 $u(x,y)$ 的分布图

例 1.2.11　(范德蒙德矩阵的 LU 分解) 设 $x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n$ 是互不相等的实数,则二阶范德蒙德(Alexandre Théophile Vandermonde,1735—1796)矩阵

$$\boldsymbol{V}_2=\begin{pmatrix}1&1\\x_1&x_2\end{pmatrix}\overset{r_{12}(-x_1)}{\sim}\begin{pmatrix}1&1\\0&x_2-x_1\end{pmatrix}=\boldsymbol{U}_2$$

因此 $\boldsymbol{L}_2=\begin{pmatrix}1&0\\x_1&1\end{pmatrix}$, 从而 $\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{U}_2$.

三阶范德蒙德矩阵

$$\boldsymbol{V}_3=\begin{pmatrix}1&1&1\\x_1&x_2&x_3\\x_1^2&x_2^2&x_3^2\end{pmatrix}\begin{matrix}r_{12}(-x_1)\\\sim\\r_{13}(-x_1^2)\end{matrix}\begin{pmatrix}1&1&1\\0&x_2-x_1&x_3-x_1\\0&x_2^2-x_1^2&x_3^2-x_1^2\end{pmatrix}$$

$$\overset{r_{23}(-x_1-x_2)}{\sim}\begin{pmatrix}1&1&1\\0&x_2-x_1&x_3-x_1\\0&0&(x_3-x_1)(x_3-x_2)\end{pmatrix}=\boldsymbol{U}_3$$

于是 $\boldsymbol{L}_3=\begin{pmatrix}1&0&0\\x_1&1&0\\x_1^2&x_1+x_2&1\end{pmatrix}$, 从而 $\boldsymbol{V}_3=\boldsymbol{L}_3\boldsymbol{U}_3$.

一般地,类推可知, n 阶范德蒙德矩阵

$$\boldsymbol{V}_n=\begin{pmatrix}1&1&\cdots&1\\x_1&x_2&\cdots&x_n\\\vdots&\vdots&&\vdots\\x_1^{n-1}&x_2^{n-1}&\cdots&x_n^{n-1}\end{pmatrix}$$

$$\sim \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & x_2 - x_1 & \cdots & x_n - x_1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (x_n - x_1)\cdots(x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} = \boldsymbol{U}_n$$

并且 $\boldsymbol{L}_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ x_1^2 & x_1 + x_2 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ x_1^{n-1} & \cdots & x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 & x_1 + \cdots + x_n & 1 \end{pmatrix}$. 从而 $\mathbf{V}_n = \boldsymbol{L}_n \boldsymbol{U}_n$.

思考:一般地，n 阶范德蒙德矩阵 $\mathbf{V}_n$ 的求逆公式是什么？使用 LU 分解法和矩阵求逆法求解方程组 $\mathbf{V}_n \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，孰优孰劣？

1.3　数值计算的几个基本概念

众所周知,运用数学理论和数值方法来解决实际问题,一般要经历这样几个阶段:首先是建立数学模型,即将实际问题归纳、抽象、提炼为数学问题,用合适的数学模型来描述,并分析与求解此模型,以得到问题的理论解或解析解. 比如要计算地球的表面积,就可将地球简化为一个球体,从而问题就转化为计算球体的表面积,然后借助于微积分知识,用公式 $S = 4\pi r^2$ 或者貌似更合理的 $S = \pi d^2$ 来加以计算. 这通常被认为是应用数学学科的任务. 不幸的是,许多数学问题难以求出甚至没有解析解(比如例 1.2.10 中提及的热传导问题),而数值方法却是求解它们的现实之道. 这就催生了第二阶段的任务,即根据所选择的数学模型及已有的理论分析,提出求解的算法,编写出合适的程序,并上机调试出结果. 一言以蔽之,这个阶段涉及算法的设计、分析与实现. 这通常被认为是计算数学学科的任务. 随着计算机科学与技术的蓬勃发展,近几十年来,不仅应用数学与计算数学的学科界限逐渐模糊,它们甚至与计算机学科相互融合,逐渐孕育并结晶出**数值计算**(numerical computing)技术或内涵更广泛的**科学计算**(scientific computing)技术. 这就要求我们两手都要硬:既要学会理论分析,又要掌握数值算法. 考虑到这两者的思维方式有时甚至南辕北辙(比如行列式的理论计算方法与数值算法),使得这一点尤为重要. 只有如此,我们才能具备初步的科学计算能力.

1.3.1　计算机的浮点数系统与舍入误差

在数值计算过程中,不可避免地会产生误差,它们主要有以下几种:

(1)模型误差,即建立数学模型的过程中,由于抽象及简化实际问题而带来的偏差. 比如地球明明是个鸭梨,你偏说它是个圆球,这就产生了模型误差. 事实上,模型误差往往是所有误差中最大的,而且难以依靠数值算法来修正. 比如若将地球看成长方体,那就谬以千里,无论怎么算,都会对不上号的.

(2)观测误差,即由于观测工具、测量手段、时空和测量人员等方面的局限性给数学模型中的参数带来的误差. 比如测量地球的半径时,无论测量工具和手段怎样先进,误差

都是不可避免的. 当然，这种误差与相关学科有关，科学计算中一般不予研究.

(3)截断误差，也称方法误差，即用数值方法得到的近似解与数学模型的精确解之间的误差. 比如在式 (1.2.15) 中，我们用泰勒多项式 $f(x) \pm f'(x)h + f''(x)h^2/2!$ 近似代替了 $f(x \pm h)$，从而产生了截断误差 $o(h^2)$. 在例 1.2.10 中，利用泰勒公式，我们还可以得到"×型"五点差分格式

$$\frac{1}{2h^2}(u_{i-1,j-1} + u_{i-1,j+1} - 4u_{ij} + u_{i+1,j-1} + u_{i+1,j+1}) = 0$$

(4)舍入误差，即由于计算机的字长有限，导致原始数据在计算机上表示时产生的误差，这种误差在计算过程中可能又会产生新的误差. 例如用有限小数 3.14 或 3.14159 近似代替无理数 π，就产生了舍入误差 $\pi - 3.14$ 或 $\pi - 3.14159$.

当然，舍入误差远没有这么简单，它与数在计算机上的表示方式有密切关系. 让我们先从计算机的浮点数系统说起.

在计算机发展的早期，各国开发的计算机都有自己的浮点数系统，有二进制的，有十进制的，或许由于冷战的原因，苏联甚至开发出一种三进制的计算机. 随着冷战氛围的逐渐消散，IEEE 联合各大学、计算机制造商、数学家、计算机科学家和工程师，历时十年，于 1985 年发布了 ANSI/IEEE 754 号标准. 如今，这个标准已经成为整个计算机行业中单精度和双精度运算的共同标准.

在 IEEE 754 标准中，**浮点数**(floating point number)由三部分组成，即符号(+ 或 −)、尾数和阶(也称指数). 浮点数有三种常用的精度等级，即单精度、双精度和长双精度，所占二进制数位分别是 32(4 字节，其中符号占 1 位、阶占 8 位、尾数占 23 位)、64(8 字节，其中符号占 1 位、阶占 11 位、尾数占 52 位)和 80(8 字节，其中符号占 1 位、阶占 15 位、尾数占 64 位).

实际的浮点数系统 F 都采用了**规格化技术**，这意味着非零浮点数 x 可以表示为

$$F = \{x \mid x = \pm(1+f) \cdot 2^p = \pm 1.d_1d_2d_3\cdots d_t \cdot 2^p\}$$

其中，1 不必存储；尾数 f 为小数 $0.d_1d_2d_3\cdots d_t$，d_1、d_2、d_3、…、d_t 取值为 0 或 1，t 为尾数的长度；p 为指数，$L \leqslant p \leqslant U$，$L$、$U$ 分别是指数的上、下界. 显然，浮点数系统 F 由 t,L,U 唯一确定，即 $F = F(t,L,U)$.

Matlab 中使用的是 IEEE 双精度格式，其中，$t = 52$,$L = -1022$,$U = 1023$，并通过存储 $p + 1023$ 避免了考虑指数 p 的正负号，这里的数 $1023 = 2^{10} - 1$ 被称为指数偏移(exponent bias)，注意 $1023 = 2^{10} - 1 = 2^{s-1} - 1$，其中，$s = 11$ 为指数的二进制位数. 由于采用 s 位二进制数表示指数 p，并且 $1 \leqslant p + 1023 \leqslant 2^{11} - 2$，因此余下两个特殊的指数值 0 和 $2^{11} - 1$，它们被用于表示浮点数的特殊值.

例 1.3.1 **(一个简单的浮点数系统)**考虑 $F = F(2,-1,4)$，图 1-8 标出了 F 中的所有 24 个正浮点数(加上对应的负浮点数和 0，F 中共有 $2 \times 24 + 1 = 49$ 个浮点数). 这些浮点数不是等间隔分布的，但在相邻的 2 的整数次幂之间，浮点数是均匀分布的. 另外，最小的正浮点数为 $2^L = 1/2$，最大的正浮点数则为 $2^{U+1}(1 - 2^{-(t+1)}) = 28$. 还有就是 0 与最小的正浮点数之间的间隔较大，这是规格化带来的后果.

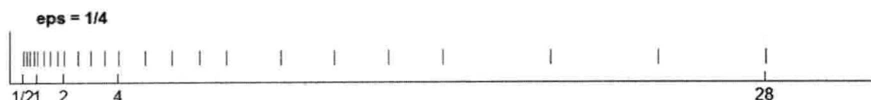


图 1-8　浮点数系统 $F=F(2,-1,4)$

在系统 $F=F(2,-1,4)$ 中，大于 1 的最小浮点数是 5/4，它与 1 的差 $\varepsilon=2^{-t}=1/4$ 被称为此系统的**机器精度**(machine epsilon，有的书上的定义与此不同). ε 或 $\varepsilon/2$ 通常被称为此系统的舍入误差级别. 比如，实数 0.7823 介于两个浮点数 3/4 与 7/8 之间，但更靠近 3/4，因此被舍入到 3/4，其舍入误差为 $0.7823-3/4=0.0313<\varepsilon/2$.

显然，无论在怎样的计算机上，$F=F(t,L,U)$ 都是一个有限集，因此实数集中几乎所有的实数都要被舍入到 F 中与之相近的浮点数，从而产生舍入误差. 这也说明舍入误差是不可避免的. 因此，**真正理解舍入误差及其在算法中的传播和对最终计算结果的影响，甚至被当做初步具备科学计算能力的重要标志.**

回到 Matlab 中的 IEEE 双精度格式，其浮点数系统为 $F=F(4,-1022,1023)$，机器精度为 $\varepsilon=2^{-52}$ (Matlab 中用常量 eps 来表示)，大约是 2.2204×10^{-16} .

浮点数加减的规则：指数相同时，加减尾数；指数不同时，将其中较小的数的尾数缩小以使两个数的指数匹配. 缩小尾数相当于在存储字节内将数据后移，这自然会造成有效数字位数的减少，使得计算结果不准确.

考察代码段

```
format long; a= 4/3; b= a- 1; c= 3* b; d= 1- c
```

如果精确计算，d 的值为 0，但使用浮点数，输出的却是 eps 的值：

$$2.220446049250313e-016$$

这是因为

$$\frac{4}{3}=+\left(1+\frac{0}{2^1}+\frac{1}{2^2}+\frac{0}{2^3}+\frac{1}{2^4}+\frac{0}{2^1}+\frac{1}{2^2}+\frac{0}{2^3}+\frac{1}{2^4}+\cdots\right)\times2^0$$

因此 a 被舍入到双精度机器数

0	011 1111 1111	0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101 0101

其中，第 1 个二进制位表示浮点数的正负号(0 为正数，1 为负数)，接下来的 11 位表示的是偏移后的指数(由于 $p=0$，因此它们表示的是 $p+1023=1023$)，余下的就表示尾数. 将这个机器数写成十六进制，就是 3ff5555555555555，这在 Matlab 中可以通过先输入命令 format hex，回车后再输入 4/3 来检查. 而 1 的机器数为 3ff0000000000000，从而根据浮点数的运算规则，a 与 1 的差 b 没有舍入，形式上应该是 0005555555555555，但经过调整，其指数变为 $p=-2$ (偏移后为 $p+1023=1021$)，其尾数前移 2 位(末尾补 0)，即 b 为 3fd5555555555554. 执行乘法 3 * b 时，采用的是 2 * b+b 的处理方式，其中 2 * b 为 3fe5555555555554，因此 b 被调整为 3feaaaaaaaaaaaaa. 这样乘积 c 就是 3feffffffffffffe，这样最终得到的差 d=1－c 就是 3cb0000000000000，即机器精度 eps.

前文中提到的两个特殊的指数值 0 和 $2^{11}-1$，当 $f=0$ 且 $p=L=-1022$ 时，对应最小的正规化浮点数；当 $f=0.111\cdots 11_{(2)}$ 且 $p=U=1023$，对应最大的正规化浮点数. 在 Matlab 中，两者分别被称作 realmin 和 realmax，前者的值为 2^{-1022}，即十六进制的 0010000000000000；后者的值为 $(2-\varepsilon)2^{1022}$，即十六进制的 7fefffffffffffff，具体的十进制实数为 2.225073858507201e－308 和 1.797693134862316e＋308. 这里要注意的是，realmin 比 eps 小得多。

如果计算结果大于 realmax，则出现"**上溢出**"现象. 此时计算结果称为无穷大，在 Matlab 中用 Inf 表示，它对应的是 $f=0$ 且 $p=1024$ 的情形，即十六进制的 7ff0000000000000. Inf 满足关系 1/Inf=0 及 Inf+Inf= Inf. 另外，在 Matlab 中定义了一个"非数"，用 NaN 表示，其十六进制为 fff8000000000000，对应 $f=0.111\cdots 11_{(2)}$、$p=U=1023$ 且符号位为 1 的情形. 比如 0/0 和 Inf－Inf 的计算结果都是 NaN.

如果计算结果小于 realmin，则出现"**下溢出**"现象. 但由于 0 与最小的正浮点数之间的间隔较大，因此 IEEE 标准中定义了一种**次规范化规则**，在指数取最小值时，允许尾数的首位取 0. 具体到 Matlab 中，就是取 $p=-1023$，这样偏移后的指数就是 $p+1023=0$. 此时，最小的正的次规范数，表示成十六进制，就是 0000000000000001，即 $2^{-52}\times 2^{-1022}=2^{-1074}$，大约是 4.9407e－324，任何小于它的正数都舍入到 0.

假设 x 是一个略小于机器精度 ε 的正浮点数，$fl(\cdot)$ 表示一个数学表达式按浮点数运算规则所得计算结果，显然 $fl(1+x)=1$，出现了"**大数吃小数**"的现象，即两个操作数大小悬殊时，较小的数(这里的 x)的信息将被较大的数(这里的 1)"吞噬".《伊索寓言》里蚊子尚能战胜狮子，但小数碰到大数，就只能呜呼哀哉了. 当然如果采取适当技巧，是可以避免被饕餮的命运的. 例如，若计算 $1+2x$ 的浮点数，按照

$$fl((1+x)+x)=fl(fl(1+x)+x)=fl(1+x)=1$$

小数 $2x$ 仍不免落入狮口，但若按 $fl(1+(x+x))>1$ 来计算，小数 $2x$ 就能幸免于难.

抵消现象也是浮点数系统中的一个重要问题. 例如两个十进制的 5 位精度数相减 $1.9876\times 10^3-1.9723\times 10^3=1.53$，得到结果却只有 3 个有效数字，而计算过程中并未舍入.

有的抵消现象也可通过适当技巧(比如改变计算公式)加以避免. 例如当 $x\approx y$ 时，可考虑以下公式：

$$\ln x-\ln y=\ln\frac{x}{y},\sqrt{x}-\sqrt{y}=\frac{1}{\sqrt{x}+\sqrt{y}},\arctan x-\arctan y=\arctan\frac{x-y}{1+xy}.$$

例 1.3.2 **(这是多项式曲线吗?)**考虑下列 Matlab 代码：

```
x = 0.988:.0001:1.012;
y = x.^7- 7* x.^6+ 21* x.^5- 35* x.^4+ 35* x.^3- 21* x.^2+ 7* x- 1;%注意元素群运算.
plot(x,y)
```

其运行结果如图 1-9 所示. 显然曲线非常不光滑，完全不像是一条多项式曲线. 究其原因，其实是舍入误差捣的鬼. 若改用代码

```
y= (x- 1).^7
```

来计算 y 的值,则回归平常.

另外,两数相除时,若除数的绝对值远小于被除数的绝对值,也会增大舍入误差,甚至导致上溢. 换一个角度看,这也意味着两数相乘时,若其中一个乘数的绝对值远大于另一个乘数的绝对值,也会增大舍入误差. 实际计算时,要尽可能调整运算次序,以避免这种情况出现. 例如,在例 1.2.6 中,使用高斯消元法时,由于第一个主元 10^{-20} 太小,导致消元时所用的乘子 -10^{20} 的绝对值太大,最终影响到了数值解的准确性. 因此,消元时我们要极力避免小主元的出现. 当然,这并不是说我们不能选取小的乘子. 事实上,列选主元法中,乘子的绝对值都小于 1.

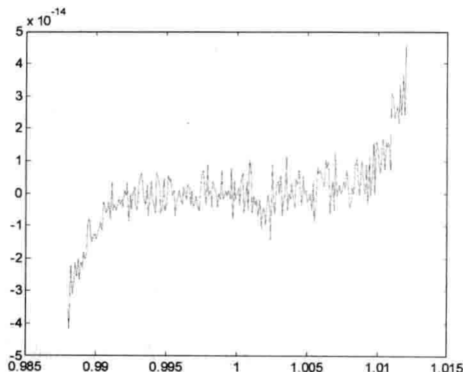


图 1-9　这也算多项式曲线?

1.3.2　问题的病态性与算法的稳定性

我们从一个经典问题谈起.

例 1.3.3　(算法的稳定性) 计算积分 $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx$ ($n = 0,1,2,\cdots$).

解: 由分部积分法可知 $I_n = \int_0^1 x^n de^{x-1} = x^n e^{x-1} |_0^1 - \int_0^1 nx^{n-1} e^{x-1} dx = 1 - nI_{n-1}$, 即有递推式

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \tag{1.3.1}$$

由于初始值 $I_0 = \int_0^1 x^0 e^{x-1} dx = 1 - e^{-1}$, 代入式 (1.3.1), 即可依次求出 $I_1, I_2, \cdots$ 的值. 问题是这只是理论分析的想法,在实际的数值计算时会出现荒谬的结果. 我们取四位小数来详细分析.

由于 I_0 中涉及无理数 e, 故用泰勒公式逼近 e^{-1}, 即

$$e^{-1} \approx 1 + (-1) + \frac{1}{2!}(-1)^2 + \cdots + \frac{1}{k!}(-1)^k$$

当 $k = 7$ 时,得 $e^{-1} \approx 0.3679$, 即 $I_0 \approx \widetilde{I}_0 = 0.6321$, 此时截断误差为 $R_7 = |e^{-1} - 0.3679| \leqslant \frac{1}{8!} < \frac{1}{4} \times 10^{-4}$. 同时递推式 (1.3.1) 变成

$$\widetilde{I}_0 = 0.6321,\ \widetilde{I}_n = 1 - n\widetilde{I}_{n-1} \quad (n = 1,2,\cdots) \tag{1.3.2}$$

按式 (1.3.1) 递推计算的结果见表 1-1. 显然,其中的 $\widetilde{I}_8 < 0$, 这与一切理论值 $I_n > 0$ 相矛盾. 实际上,根据定积分的估值定理, $M = \max\limits_{0 \leqslant x \leqslant 1} e^{x-1} = 1$, $m = \min\limits_{0 \leqslant x \leqslant 1} e^{x-1} = e^{-1}$, 而 $\int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}$, 从而

$$\frac{e^{-1}}{n+1}=m\int_0^1 x^n\mathrm{d}x<I_n<M\int_0^1 x^n\mathrm{d}x=\frac{1}{n+1} \tag{1.3.3}$$

表 1-1　积分 $I_n=\int_0^1 x^n e^{x-1}\mathrm{d}x$ 的两种算法

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
算法 1	0.6321	0.3679	0.2642	0.2074	0.1704	0.1480	0.1120	0.2160	−0.7280	7.5520
算法 2	0.6321	0.3679	0.2642	0.2074	0.1709	0.1455	0.1268	0.1121	0.1035	0.0684

为什么算法 1 的计算结果越来越荒谬(比如 $\widetilde{I}_9=7.5520>1$，这明显不靠谱)？这是因为算法 1 从一开始就存在误差 $e_0=I_0-\widetilde{I}_0=-R_7$，而

$$e_n=I_n-\widetilde{I}_n=(1-nI_{n-1})-(1-n\widetilde{I}_{n-1})=-ne_{n-1} \tag{1.3.4}$$

因此 $e_n=-ne_{n-1}=(-n)(-(n-1))e_{n-2}=\cdots=(-1)^n n!e_0$. 初始误差被积累和传播后，竟被放大 $n!$ 倍，差若毫厘，缪以千里，因此算法 1 是不稳定的.

换一种思路. 注意到由式 (1.3.4) 可知 $e_{n-1}=-(1/n)e_n$，因此如果能先算出 $\widetilde{I}_n$，那么 $\widetilde{I}_{n-1}$ 的误差 e_{n-1} 就缩小为 $\widetilde{I}_n$ 的误差 e_n 的 $1/n$. 这意味着我们可以采用如下的倒推计算格式：

$$\widetilde{I}_{n-1}=\frac{1}{n}(1-\widetilde{I}_n)\quad(n=9,8,\cdots,2,1) \tag{1.3.5}$$

问题转化为必须寻找一个“好”的 $\widetilde{I}_9$. 由式 (1.3.3) 可知 $0.1\cdot e^{-1}<I_9<0.1$，因此可取上下界的平均值，即令 $\widetilde{I}_9=(0.1\cdot e^{-1}+0.1)/2\approx 0.0684$，于是由式 (1.3.5) 可依次算出 $\widetilde{I}_9,\widetilde{I}_8,\cdots,\widetilde{I}_1,\widetilde{I}_0$，结果见表 1—1. 尽管初始值 $\widetilde{I}_9$ 比较粗糙，但由于误差是逐步缩小的，因此算法 2 是稳定的.

定义 1.3.1　如果一个数值算法的输入数据有误差，而计算过程中误差不增长，则称该算法是**稳定的**(stable)，否则，就称该算法是**不稳定的**(unstable).

显然算法的**稳定性**(stability)反映了使用该算法进行计算的过程中，扰动对计算结果的影响程度，因此是算法的一个重要属性. 我们努力寻求的，就是误差逐步衰减(至少是不扩散)的稳定性算法. 稳定与否显然是我们评价算法优劣的一个重要指标因素.

通过例 1.2.6 我们看到，不选主元的高斯消元法是不稳定的. 至于列选主元法，虽然对某些矩阵是高度不稳定的，但这样的矩阵数量相当少，因此列选主元法至少在统计意义下是稳定的.

在矩阵计算中，还经常涉及向后误差分析法.

定义 1.3.2　**向后误差**(backward error)指的是一种初始误差，它是由将结果误差折算而得来的. **向后误差分析**(backward error analysis)考察的就是这种初始误差即原始数据的摄动或扰动对最终计算结果的影响.

以求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 为例，假定数值解为 $\widetilde{\boldsymbol{x}}$，向后误差分析法就是将 $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ 看成对 $\boldsymbol{A}$ 及 $\boldsymbol{b}$ 分别扰动 $\Delta\boldsymbol{A}$ 及 $\Delta\boldsymbol{b}$ 后所得的精确解，即 $(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})\widetilde{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$，其中 $\Delta\boldsymbol{x}=\widetilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}$ 就

是向后误差. 我们会在 5. 3. 2 节进行详细讨论.

威尔金森在 20 世纪 60 年代利用向后误差分析法对高斯消元过程中的舍入误差进行了仔细分析,并最终得出了关于高斯消元法的稳定性的结论. 他的伟大工作极大地夯实了矩阵计算的理论根基,拓展了矩阵计算的理论深度.

桓侯之疾尚在腠理、肌肤、肠胃之间时,尚可应之以汤熨、针石、火齐等术. 一旦疾入骨髓,纵神医扁鹊,亦无奈何也. 在数值计算中,屡屡让我们“无奈何”的就是各种病态的问题.

定义 1. 3. 3　对于一个数值问题,如果输入数据的微小变动会引起输出数据(即问题的解)的很大扰动(误差),则称这个问题是**病态的**(ill-conditioned)或**敏感的**(sensitive);反之,这个问题就是**良态的**(well-conditioned)或**稳定的**.

显然,例 1. 2. 6 中的方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 就是一个良态的问题,因为用列选主元法计算其扰动方程组 (1. 2. 10),得到的解为 $\tilde{\boldsymbol{x}}=(-1,1+10^{-20})^{\mathrm{T}}$,与扰动前的理论解 $\boldsymbol{x}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$ 非常接近. 事实上,在 Matlab 中,$\tilde{\boldsymbol{x}}$ 被舍入到了 $\boldsymbol{x}$,扰动的影响已经完全被忽略了.

例 1. 3. 4　**(系数矩阵几乎不可逆的线性方程组)** 考虑求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$,其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0.99\\ 0.99 & 1\end{pmatrix},\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}$$

显然,$\boldsymbol{x}=(50.251,-49.749)^{\mathrm{T}}$. 将两个系数 0. 99 都扰动成 0. 991,则可得 $\tilde{\boldsymbol{x}}=(55.807,-55.304)^{\mathrm{T}}$,误差 $\boldsymbol{e}=\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}=(-5.555,5.556)^{\mathrm{T}}$. 系数矩阵元素上仅有 0. 001 的误差,而计算结果的误差却被放大了 5 千多倍。究其原因,是因为 $|\boldsymbol{A}|=0.0199\approx 0$,即 $\boldsymbol{A}$ 几乎不可逆,从而此方程组几乎无解.

最有名的病态矩阵恐怕非 **Hilbert 矩阵 $\boldsymbol{H}$** 莫属,其元素为 $h_{ij}=\dfrac{1}{i+j-1}$. Matlab 中提供了内置函数 hilb 可用于生成 Hilbert 矩阵,比如代码 hilb(3)生成的就是三阶 Hilbert 矩阵

$$\boldsymbol{H}=\begin{pmatrix}1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5}\end{pmatrix}$$

在矩阵计算中存在着大量病态问题,对它们的求解需要构造出特殊的算法,当然,天下没有免费的午餐,这些算法会消耗更多的资源.

我们要特别强调的是,病态与良态或“好”与“坏”是数值问题本身所固有的,是骨髓层面的问题,与算法无关. 稳定的问题与稳定的算法是不可混为一谈的.

稳定性与现代控制理论中的**鲁棒性**(robustness,又称健壮性)也极易混淆. 在现代

控制理论中,所谓鲁棒性,是指控制系统在一定(结构,大小)的参数摄动(扰动)下,维持某些性能的特性,也就是系统在内部结构发生扰动的情况下,外部干扰抵御能力的保持能力,其着眼点在于这个控制系统.对鲁棒性的研究,主要限于线性定常控制系统.

1.3.3 算法的计算复杂性

计算复杂性在 1.1.2 小节中已详细讨论过,这里仅再举两个例子.

正如 1.2 节所述,初等行变换法即高斯消元法本质上是矩阵的 LU 分解.如果消去过程中还需要实施矩阵行的交换,则相应的列选主元法本质上就是矩阵的 PA=LU 分解.

例 1.3.5 **(未进行行交换的高斯消元法的复杂性分析)**考虑用高斯消元法求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的过程,其中 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶可逆矩阵,且有 LU 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$.

先考虑消元过程.假设消元过程中出现的主元都不为 0,并且经过第 k 步消元后,方程组变成 $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k)}$ $(k=0,1,2,\cdots,n-1)$,其中 $\boldsymbol{A}^{(0)}=\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}^{(0)}=\boldsymbol{b}$. 显然 $\boldsymbol{A}^{(n-1)}=\boldsymbol{U}$.

当 $k=1$ 时,由于第 1 个主元 $a_{11}^{(0)}\neq 0$,因此我们依次取 $n-1$ 个乘子 $m_{i1}=-a_{i1}^{(0)}/a_{11}^{(0)}$ $(i=2,3,\cdots. n)$,并通过变换 $r_{1i}(m_{i1})$,将第 1 列中的 $n-1$ 个元素 $a_{i1}^{(0)}$ 都变为 0,从而得到 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(1)}$,即

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

一般地,在第 k 步消元时,由于第 $k-1$ 个主元 $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$,因此我们依次取 $n-k$ 个乘子 $m_{ik}=-a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}$ $(i=k+1,\cdots,n-1,n)$,并通过变换 $r_{ki}(m_{ik})$,将第 k 列中的 $n-k$ 个元素 $a_{ik}^{(k-1)}$ 都变为 0,从而得到 $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k)}$,即

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & a_{1,k+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{k,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ b_{k+1}^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

显然,在第 k 步消元时,每个乘子 m_{ik} 涉及 1 次除法、变换 $r_{ki}(m_{ik})$ 中的 $n-k+1$ 次乘

法(不必考虑 m_{ik} 与主元 $a_{kk}^{(k-1)}$ 相乘的一次乘法,但需计入 m_{ik} 与 $b_k^{(k-1)}$ 相乘的一次乘法)及 $n-k+1$ 次加减法(同样不必考虑 $a_{ik}^{(k-1)}$ 与 $m_{ik}a_{kk}^{(k-1)}$ 之间的一次加减法,但需计入 $b_i^{(k-1)}$ 与 $m_{ik}b_k^{(k-1)}$ 之间的一次加减法),即共需 $2n-2k+3$ 次运算.这样,$n-k$ 个乘子的总运算量就是 $(n-k)(2n-2k+3)$ 次.再考虑到消元的总步数为 $n-1$ 步,则消元过程的总运算量就是

$$\begin{aligned}N_1 &= \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(2n-2k+3) = \sum_{n-k=1}^{n-1}\left[2(n-k)^2+3(n-k)\right]\\ &= \sum_{l=1}^{n-1}(2l^2+3l) = \frac{2}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2-\frac{7}{6}n\end{aligned}$$

再考虑回代过程.此时求解的是三角方程组 $\boldsymbol{A}^{(n-1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(n-1)}$,令 $\boldsymbol{b}^{(n-1)}=\boldsymbol{y}$,此即 $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$.参考例 1.2.1 后的复杂性分析可知,回代过程的总运算量为 $N_2=\sum_{i=1}^{n}(n-i+n-i+1)=n^2$,因此高斯消元法的总运算量为 $N=N_1+N_2=\frac{2}{3}n^3+\frac{3}{2}n^2-\frac{7}{6}n$,即其时间复杂度为 $T(n)=O(n^3)$.

高斯消元法本质上是矩阵的 LU 分解,而 LU 分解显然不必回代.在消元过程的运算量中,我们只要去掉涉及常数列的运算量,即在第 k 步消元时,每个乘子 m_{ik} 涉及 1 次除法、变换 $r_{ki}(m_{ik})$ 中的 $n-k$ 次乘法及 $n-k$ 次加减法.这样,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 LU 分解的总运算量 $N=\frac{2}{3}n^3-\frac{1}{2}n^2-\frac{1}{6}n$,时间复杂度仍然为 $T(n)=O(n^3)$.

思考:乘子 m_{ik} 与矩阵 $\boldsymbol{L}$ 中的元素 l_{ik} 之间是什么关系?求出矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的同时是否也就求出了矩阵 $\boldsymbol{L}$?

例 1.3.6 (秦九韶算法)继续考虑例 1.3.2 中多项式 $y=(x-1)^7$ 的计算.

一般地,多项式 $y=c_1+c_2x+c_3x^2+c_4x^3+c_5x^4$ 可改写为

$$y=c_1+x\{c_2+x[c_3+x(c_4+x(c_5))]\} \tag{1.3.6}$$

我们可以从里往外进行计算.注意,此时系数是降幂变化的,即从 c_5 逐次降到 c_1.分析可知,式 (1.3.6) 中只需 4 次乘法和 4 次加法,因此计算一个 d 次多项式的值,通常只需 $2d$ 次的运算量.这种方法称为**嵌套乘法**(nested multiplication).据此可编写自定义的 nest 函数如下:

```
function y= nest(d,c,x)
y= c(d+1);
for i= d:-1:1,y= y.* x+ c(i); end %注意小黑点
```

程序中借助 Matlab 中向量记法的无缝处理,采用了元素群运算“.*”,使得 nest 函数能够计算一组多项式值.在此基础上,我们用下列代码重新计算 y 的值,得到的多项式曲线如图 1-10 所示.

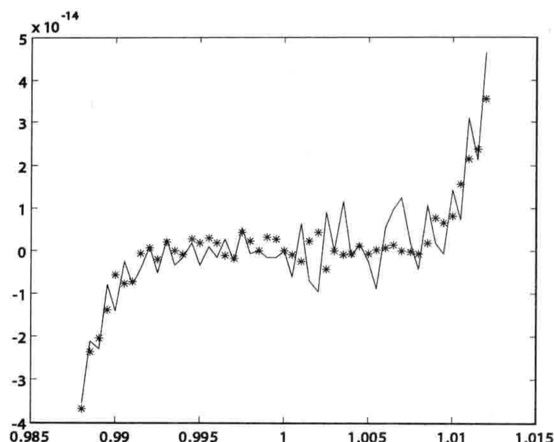


图 1－10　秦九韶算法

```
hold on;x = 0.988:.0005:1.012;y= [ ];d= 7; %步长改为 0.005,d 为多项式的次数
syms t;c= sym2poly((t- 1)^7); %获取多项式的系数(降幂排列)
c= fliplr(c) %将多项式的系数转变成升幂排列
y= nest(d,c,x); %调用自定义函数 nest
plot(x,y,'* ') %绘出的仍然是心电图,但比方法一平滑
```

在西方，人们将这种方法归功于霍纳（William George Horner，1786－1837，他还证明了平面几何中著名的蝴蝶定理），但最近又有学者指出另有其人. 事实上，这个方法是中国人提出的，确切地说应该称为秦九韶算法，因为南宋数学家秦九韶（见图 1－11）在其《数书九章》(1247 年成书)中，通过求解“尖田求积”等问题，已明确提出了一种“正负开方术”，其实质就是利用嵌套乘法求解高次方程，这比西方早了五百多年. 当然，秦九韶的成就远不限于此. 在我国古籍《孙子算经》(约成书于四五世纪，作者不详)中，有个“物不知数”问题：“今有物，不知其数，三三数之剩二，五五数之剩三，七七数之剩二，问物几何?”这是现代数论中求解一次同余方程组的问题，被称为“中国剩余定理”，其一般形式为



图 1－11　秦九韶(1208—1261)的传记

$$N \equiv R_i \pmod{m_i} \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{1.3.7}$$

其中，$m_1, m_2, \cdots, m_n$ 是两两互素的正整数. 方程组 (1.3.7) 的解为

$$N \equiv \sum_{i=1}^{n} M_i M_i' R_i \pmod{m} \tag{1.3.8}$$

其中，$m = m_1 m_2 \cdots m_n$，$M_i = m/m_i$，$M_i M' \equiv 1 \pmod{m_i}$，$i = 1, 2, \cdots, n$. 秦九韶在其《数书九章》中，提出“大衍求一术”，系统地解决了中国剩余定理.

1.4 线性方程组的数值解法概述

线性方程组求解、最小二乘问题、特征值问题是数值线性代数(又称矩阵计算)的三大基本问题. 正如前面我们所看到的,线性方程组的求解几乎与人类文明同行,因而历史最为悠久,也最源远流长,这也催生了各种各样的方法,它们五花八门、争奇斗艳.

按使用的基本思想,数值计算大体上可分为直接法和迭代法. 所谓**直接法**(direct method),就是假定在计算过程中没有舍入误差,而且理论上只需要经过有限步计算就能得到精确解的解法. 这类方法特别适用于中小型问题. 至于**迭代法**(iterative method),则是不直接求出精确解,而是通过一个近似序列逐步逼近问题的精确解,因为此序列的极限才是问题的精确解,因此只经过有限次运算一般得不到精确解.

线性方程组的数值解法自然也可如此分类. 不过对于线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解问题,一般还按系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的阶数或维数,将之划分为中小规模的问题(比如矩阵的阶数不超过 1000)和大规模的问题. 这是因为随着维数增加,我们将很快面临"维数灾难(curse of dimensionality,又译为'维数之咒')". 如何化解"维数灾难",是目前各类工程和科学计算对数值线性代数研究的热切期盼,也是当前的研究热点. 当然,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否为特型或特性矩阵,也是重要的考虑因素. 尤其是大规模矩阵,一般都具有各种特型和特性结构,比如稀疏性(即 $\boldsymbol{A}$ 中非零元素很稀疏,一般不超过 10%)、对称性、带状性,等等. 这自然就催生了各种保结构算法.

我们在线性代数中学到的各种解线性方程组的方法(比如前面提到的"四朵金花"),以及 LU 分解和后文中要学习的 Jordan 分解、QR 分解、SVD 分解等方法,都可归入直接法之列. 这些方法一般都涉及矩阵分解,即将矩阵分解为几个特殊矩阵的乘积,从而将一般线性方程组的求解问题转化为几个特殊线性方程组的求解问题. 完成矩阵分解的途径最终都会落实到初等变换,即通过各种变换将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变成特殊矩阵,比如 LU 分解就是把 $\boldsymbol{A}$ 变成上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$,相似对角化就是通过相似变换("打包"后的初等变换)把实对称矩阵变成对角矩阵,正交对角化则是通过正交变换(特殊的相似变换)把实对称矩阵变成对角矩阵. 这些方法的算法复杂性分析一般就是计算或估算算法的运算量,如我们对"四朵金花"和高斯消元法的分析. 当然,由于舍入误差的存在,纯粹意义上的直接法是不存在的. 要特别注意的是,直接法也可用于求解大规模问题. 对于稀疏的大规模线性方程组,直接法的基本思想仍然是高斯消元法,但需要考虑"填入现象",而且算法设计和实现都涉及很多技巧. 因此,目前的一种趋势是采取结合策略,即糅合直接法和迭代法各自的优势,如线性方程组求解的预处理迭代法.

不动点迭代(fixed-point iteration)指的是用迭代方程 $\boldsymbol{x}=\varphi(\boldsymbol{x})$ 或迭代格式 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\varphi(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 迭代产生近似解序列

$$\boldsymbol{x}^{(0)},\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{x}^{(k)},\cdots$$

这样,当 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 收敛于 $\boldsymbol{x}^*$ 即 $\boldsymbol{x}^{(k)}\to\boldsymbol{x}^*$ 时,$\boldsymbol{x}^*$ 就是满足迭代方程 $\boldsymbol{x}=\varphi(\boldsymbol{x})$ 的**不动点**(fixed-point).

类似地,用迭代法求解线性方程组时,必须把 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 转化为迭代方程 $\boldsymbol{x}=\varphi(\boldsymbol{x})$, 显然 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 必须保持“线性性”,即它必须是向量 $\boldsymbol{x}$ 的“线性函数”: $\varphi(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{f}$, 其中矩阵$\boldsymbol{B}$ 为常数矩阵,称为**迭代矩阵**(iteration matrix). 此时,迭代方程为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{f}$, 迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{f}\quad(k=0,1,2,\cdots)\tag{1.4.1}$$

显然,对迭代法来说,必须注意以下问题:

①如何构造迭代序列?

②构造的迭代序列是否收敛? 何时收敛?

③如何刻画并比较各种方法收敛的快慢?

④近似解的误差估计,等等.

当然,如何构造迭代格式,存在着千差万别的方法. 按照所用的思想及提出的时间,我们可将线性方程组求解的迭代法大致划分为古典迭代法和现代迭代法. 前者主要依据矩阵分裂技巧,后者是基于投影的子空间迭代法,包括 Arnoldi 法、Lanczos 法和共轭梯度法,等等.

如今,几乎所有的数值计算软件都具有求解线性方程组的功能. 早期,它们使用的是线性系统软件包 LINPACK (LINear system PACKage) ,目前则多为线性代数软件包 LAPACK (Linear Algebra PACKage). 这两个软件包基本上都采用了部分选主元技术,可处理单精度和双精度的实(复)矩阵.

LINPACK 是 Matlab 的创始人莫勒等人于 1974 年起用 Fortran 语言编写的软件包,旨在帮助他们的学生使用当时的超级计算机,目前大部分功能已经被 LAPACK 超越. LAPACK 是免费的程序包,可用于求解线性方程组、最小二乘问题、特征值问题和奇异值分解. 它也提供了 LU 分解、QR 分解、Cholesky 分解和 Schur 分解等矩阵分解的实现程序. LAPACK 最初是用 FORTRAN 77 实现的,但在 2008 年已更新为 FORTRAN 90. LAPACK 的程序在少量限制和约束下,也几乎可以作为 C 函数来使用. 各种用 C++实现的 LAPACK C++和 Armadillo C++(基于模板编程技术)目前也正在演化中.

LAPACK 的底层使用了基本线性代数子程序 BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms). BLAS 是一个应用程序接口(API)标准,用以规范发布基础线性代数操作的数值库(如矢量或矩阵乘法). 该程序集最初发布于 1979 年,并用于建立更大的数值程序包(如 LAPACK). 在高性能计算领域,BLAS 如今已被广泛使用.

按实现功能,BLAS 被分为三个级别:

(1) BLAS1 的计算复杂度是 $O(n)$, 涉及向量的数乘、点积和向量的更新(注意返回的是向量),例如 $\boldsymbol{x}\leftarrow a\boldsymbol{x}$、$a\leftarrow\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 和 saxpy 运算 $\boldsymbol{y}\leftarrow a\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$;

(2) BLAS2 的计算复杂度是 $O(n^2)$, 涉及矩阵向量乘法或向量的外积运算(注意返回的是矩阵),例如 gaxpy 运算 $\boldsymbol{y}\leftarrow\boldsymbol{Ax}+\boldsymbol{y}$ 和外积修正 $\boldsymbol{A}\leftarrow\boldsymbol{A}+\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}$;

(3) BLAS3 的计算复杂度是 $O(n^3)$, 涉及矩阵乘法,例如矩阵相乘的修正 $\boldsymbol{C}\leftarrow\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{C}$.

习 题 一

1.1 证明定理1.1.1和定理1.1.2.

1.2 证明定理1.2.2.

1.3 求下列矩阵的LU分解和PA=LU分解:

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&3&4\\1&1&9\\1&2&-6\end{pmatrix}$; (2) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&3&4\\3&5&2\\4&3&30\end{pmatrix}$;

(3) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&1\\4&2&0\\6&3&2\end{pmatrix}$; (4) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&-1&3\\1&2&1\\2&4&2\end{pmatrix}$.

1.4 利用LU分解解方程组$\begin{cases}2x_1+3x_2+4x_3=1,\\x_1+x_2+9x_3=-7,\\x_1+2x_2-6x_3=9.\end{cases}$

1.5 矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$能否进行LU分解? PA=LU分解呢? 为什么?

1.6 设$\boldsymbol{A}$是秩为r的n阶矩阵,且$\Delta_k\neq0\ (k=1,2,\cdots,r)$,证明:存在LU分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$,且$\boldsymbol{L}$或$\boldsymbol{U}$是可逆矩阵.

1.7 求对称正定矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}5&-2&0\\-2&3&-1\\0&-1&1\end{pmatrix}$的Cholesky分解.

1.8 求三对角矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&0&0\\1&2&1&0\\0&1&3&1\\0&0&1&4\end{pmatrix}$的LU分解.

1.9 设$\boldsymbol{A}$是可逆矩阵,证明$\begin{vmatrix}\boldsymbol{A}&\boldsymbol{B}\\\boldsymbol{C}&\boldsymbol{D}\end{vmatrix}=|\boldsymbol{A}|\cdot|\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}|$.

1.10 设$\boldsymbol{A}$为$m\times n$阶矩阵,$\boldsymbol{B}$为$n\times m$阶矩阵,证明$|\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{AB}|=|\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{BA}|$,并给出$m=1$时的情形.

1.11 写出n阶范德蒙德矩阵$\boldsymbol{V}_n$的求逆公式.

第2章 线性空间与线性变换

伟大的罗素(Bertrand Russell,1872—1970)曾经喟叹道:"发现一对鸡、两昼夜都是2的实例,一定需要很多年代,其中所包含的抽象程度确实不易达到."的确,寓言里的猴子就没弄明白"朝三暮四"与"朝四暮三"的相同之处,因为其实质是加法交换律,即 $a+b=b+a$. 在《原始思维》中,列维-布留尔(Levy-Bruhl,Lucien,1857—1939)则认为,"原始人"的思维是具体的思维,亦即不知道因而也不应用抽象概念的思维,因此"原始人的智力过程,与我们惯于描述的我们自己的智力过程是不一致的". 撇开他的是非功过不谈,他的研究说明抽象思维对我们可谓功莫大焉. 而在以高度的抽象性著称的数学中,抽象更是扮演着重要的角色.

2.1 从解空间到向量空间

2.1.1 从齐次线性方程组的求解谈起

让我们先从"原始人"做起. 众所周知,求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的通解时,我们不仅要把系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化成行阶梯形 $\boldsymbol{H}_A$,还要乘胜追击,将 $\boldsymbol{H}_A$ 进一步化到行最简矩阵 $\boldsymbol{U}_A$.

例 2.1.1 解齐次线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$,其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&1&4&-3\\1&-1&3&-2&-1\\2&1&3&5&-5\\3&1&5&6&-7\end{pmatrix}$.

由行最简矩阵 $\boldsymbol{U}_A$,得同解方程组

$$\begin{cases}x_1=-2x_3-x_4+2x_5\\x_2=x_3-3x_4+x_5\end{cases}$$

令 $x_3=C_1,x_4=C_2,x_5=C_3$,则得方程组的通解

$$x_1=-2C_1-C_2+2C_3,x_2=C_1-3C_2+C_3,x_3=C_1,x_4=C_2,x_5=C_3$$

写成列向量形式,就是

$$\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\\x_4\\x_5\end{pmatrix}=C_1\begin{pmatrix}-2\\1\\1\\0\\0\end{pmatrix}+C_2\begin{pmatrix}-1\\-3\\0\\1\\0\end{pmatrix}+C_3\begin{pmatrix}2\\1\\0\\0\\1\end{pmatrix}\equiv C_1\boldsymbol{\alpha}_1+C_2\boldsymbol{\alpha}_2+C_3\boldsymbol{\alpha}_3.$$

显然,选好解向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 后,通解即为该向量组的一切线性组合的集合

$$S=\{\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}=C_1\boldsymbol{\alpha}_1+C_2\boldsymbol{\alpha}_2+C_3\boldsymbol{\alpha}_3, C_1、C_2、C_3\in\mathbb{R}\}$$

我们称这样的 S 为方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的**解空间**(solution space)或矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**零空间**(null space).显然,对任意 $\boldsymbol{x}=C_1\boldsymbol{\alpha}_1+C_2\boldsymbol{\alpha}_2+C_3\boldsymbol{\alpha}_3\in S$、$\boldsymbol{y}=C'_1\boldsymbol{\alpha}_1+C'_2\boldsymbol{\alpha}_2+C'_3\boldsymbol{\alpha}_3\in S$ 及 $k\in\mathbb{R}$,有

$$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=(C_1+C'_1)\boldsymbol{\alpha}_1+(C_2+C'_2)\boldsymbol{\alpha}_2+(C_3+C'_3)\boldsymbol{\alpha}_3\in S$$
$$k\boldsymbol{x}=(kC_1)\boldsymbol{\alpha}_1+(kC_2)\boldsymbol{\alpha}_2+(kC_3)\boldsymbol{\alpha}_3\in S$$

这说明集合 S 对向量的线性运算(即加法和数乘)封闭,即:

(1) $\nu_1\in S\Rightarrow C\nu_1\in S$;

(2) $\nu_1\in S,\nu_2\in S\Rightarrow\nu_1+\nu_2\in S$.

Matlab 中提供了内置函数 null,用于求解矩阵的零空间.要得到上面的结果,还必须提供一个参数,即使用命令

```
Z= null(A,'r')
```

这里的参数'r'表示返回的是用有理数(rational number)表示的基,这样返回的矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 就是矩阵 $(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$. 其实现原理是先求出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行最简形 $\boldsymbol{U}_A$,再通过适当取值,构造出矩阵 $\boldsymbol{Z}$. 具体可参考 ATLAST 程序包(见本书配套程序)中的函数 nulbasis,这个程序包是 NSF(National Science Foundation,美国国家科学基金会)资助的 ATLAST (Augment the Teaching of Linear Algebra though the use of Software Tools,用软件工具增强线性代数的教学)项目的重要成果.

2.1.2　向量空间

现在用"文明人"的眼光来考察集合 S. 让我们且行且思,慢慢"享受"这抽象的过程. 首先,我们把目光聚焦在 S 的元素所具有的一般性质上,因为具有这种性质的集合大量存在.

定义 2.1.1　如果 V 是 n 维列向量的非空集合,并且 V 对于加法及数乘这两种向量运算都封闭,那么就称集合 V 为**向量空间**(vector space).

按此定义,集合 S 就是一个向量空间. 特别地,仅有一个零向量的集合 $\{\boldsymbol{0}\mid\boldsymbol{0}=(0,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}\}$ 也是向量空间,我们称之为**零空间**(zero space,注意不要与矩阵的零空间混淆).

例 2.1.2　全体 3 维向量的集合显然是一个向量空间,记为 $\mathbb{R}^3$. 一般地,全体 n 维向量的集合 $\mathbb{R}^n$ 是一个向量空间.

例 2.1.3　集合 $T=\{\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}=(x_1,x_2,0)^{\mathrm{T}},x_1,x_2\in\mathbb{R}\}$ 是一个向量空间. 因为对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in T$ 及任意 $k\in\mathbb{R}$，都有

$$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=(x_1,x_2,0)^{\mathrm{T}}+(y_1,y_2,0)^{\mathrm{T}}=(x_1+y_1,x_2+y_2,0)^{\mathrm{T}}\in T$$
$$k\boldsymbol{x}=(kx_1,kx_2,0)^{\mathrm{T}}\in T$$

例 2.1.4　集合 $Q=\{\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}=(x_1,x_2,1)^{\mathrm{T}},x_1,x_2\in\mathbb{R}\}$ 不是一个向量空间. 这是因为加法和数乘都不封闭,例如 $2\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}=(2x_1,2x_2,2)^{\mathrm{T}}\notin Q$.

从几何上看，Q、T 都是平面，而且 $Q\parallel T$，但前者不是向量空间,后者却是向量空间. 这是因为 T 过原点,而 Q 不过原点. 一般地，$\mathbb{R}^n$ 中不过原点的平面都不是向量空间.

接着来考察 S 中元素 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 与 S 的关系.

例 2.1.5　向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s\in\mathbb{R}^n$ 的所有线性组合的集合

$$\{\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s,k_1,k_2,\cdots,k_s\in\mathbb{R}\}$$

是向量空间,记为 $\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$.

我们称 $\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$ 是由向量 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 所**张成**(span)的向量空间,并称 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 为此空间的**生成元**(set of generators). 注意,生成元是无序的,即

$$\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_2)=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=\cdots=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)$$

并且向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 未必一定是线性无关的.

显然,在例 2.1.1 中，$S=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)\subset\mathbb{R}^5$，即 S 是 $\mathbb{R}^5$ 的子空间. 一般地,我们定义子空间的概念如下：

定义 2.1.2　设有向量空间 V_1 及 V_2. 如果 $V_1\subseteq V_2$，则称 V_1 是 V_2 的**子空间**(subspace).

显然,例 2.1.3 中的 T 是 $\mathbb{R}^3$ 中的任意向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$ 在 Ox_1x_2 平面上的投影向量所构成的向量空间,我们称之为**投影子空间**(projective subspace). 另外,向量空间 V 是它自己的子空间,而零空间则是所有向量空间的子空间.

例 2.1.6　$\mathbb{R}^2$ 不是 $\mathbb{R}^3$ 的子空间，$\widetilde{\mathbb{R}}^3=\{x=(x_1,x_2,0)^{\mathrm{T}}\mid x_1,x_2\in\mathbb{R}\}$ 才是 $\mathbb{R}^3$ 的子空间.

回看 S 的生成元 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$. 易知 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 线性无关,即向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 的秩为 3，也即

$$k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+k_3\boldsymbol{\alpha}_3=\mathbf{0}\Leftrightarrow k_1=k_2=k_3=0$$

不过,作为 S 的生成元,此向量组是否唯一呢? 生成元的个数应该是多少呢?

定义 2.1.3　如果向量空间 V 中存在一组向量 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 和任意向量 $\boldsymbol{\alpha}$，满足：

(1) $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 线性无关,即向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 的秩为 r；

(2) $\boldsymbol{\alpha}$ 都能由 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 唯一地线性表示,即存在唯一的一组数 $x_1,x_2,\cdots,x_r$，使得

$$\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\alpha}_1+x_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+x_r\boldsymbol{\alpha}_r \tag{2.1.1}$$

则称 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 为 V 的一组**基**(base),称 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 为第 i 个**基向量**(base vector)($i=1,2,\cdots,$

r)，称 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_r)^{\mathrm{T}}$ 为向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 在这组基下的**坐标向量**(coordinate vector)，其中的 x_i 被称为向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 在这组基下的第 i 个**坐标**(coordinate). 另外，称这组基中的向量个数 r 为向量空间 V 的**维数**(dimension)，记为 $\dim V=r$.

按此定义，例 2.1.1 中的向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 就是解空间 S 的一组基，即 S 的维数为 $\dim S=3$.

几点说明：

(1)若令 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r)$，则式(2.1.1)可以写成 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{\alpha}$，这样求向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 下的坐标 $x_1,x_2,\cdots,x_r$，就转化为求线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{\alpha}$ 的解向量 $\boldsymbol{x}$. 显然，此方程组有唯一解.

(2)向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的坐标向量 x 既是 $\boldsymbol{\alpha}$ 的唯一标识，也反映了 $\boldsymbol{\alpha}$ 的构成方式，即以 x_i 为权重取相应的基向量 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 组合而成.

(3)若把向量空间 V 看做无穷个向量组成的向量组，那么 V 的基就是该向量组的极大无关组，V 的维数就是该向量组的秩.

(4)注意一组基中的基向量是无序的，但向量在给定的一组基下的坐标向量 $\boldsymbol{x}$ 却是有序的.

(5)若向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 是向量空间 V 的一组基，则 $V=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r)$.

(6)个数与向量空间 V 的维数相等的线性无关组都是 V 的基，因此基不是唯一的.

(7)基向量个数为有限数的向量空间称为**有限维向量空间**，否则称为**无限维向量空间**.

(8)对 $\mathbb{R}^3$ 而言，其 0 维子空间是零空间 $\{\boldsymbol{0}\mid\boldsymbol{0}=(0,0,0)^{\mathrm{T}}\}$，其 1 维子空间是经过原点的任意直线，其 2 维子空间是经过原点的任意平面，其 3 维子空间是它自身.

(9)复数域 $\mathbb{C}$ 是 2 维向量空间，因为任意复数 $z=a+bi$ 可写成 $z=a\cdot 1+b\cdot i$，其中 $i=\sqrt{-1}$，即 z 在基 $1,i$ 下的坐标向量为 $(a,b)^{\mathrm{T}}$.

例 2.1.7　已知向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1=\begin{pmatrix}1\\2\\-1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=\begin{pmatrix}3\\1\\0\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{\alpha}_3=\begin{pmatrix}-7\\1\\2\end{pmatrix}$ 和 $\boldsymbol{\beta}_1=\begin{pmatrix}0\\5\\-3\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{\beta}_2=\begin{pmatrix}-3\\-11\\6\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{\beta}_3=\begin{pmatrix}-1\\3\\2\end{pmatrix}$，证明 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的基，并求 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 在此基下的坐标.

分析：若 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的基，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 线性无关，即矩阵 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$ 可逆. 至于求 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 下的坐标，也就是寻找一组数 x_{ij} $(i,j=1,2,3)$，使得

$$\boldsymbol{\beta}_j=x_{1j}\boldsymbol{\alpha}_1+x_{2j}\boldsymbol{\alpha}_2+x_{3j}\boldsymbol{\alpha}_3\quad(j=1,2,3)$$

写成矩阵形式，就是

$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)\begin{pmatrix}x_{11}&x_{12}&x_{13}\\x_{21}&x_{22}&x_{23}\\x_{31}&x_{32}&x_{33}\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)\boldsymbol{X}$$

即求 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 下的表示矩阵 $\boldsymbol{X}$. 若记 $\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3)$，则问题又转化为求矩

阵方程 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{B}$ 的解 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}$.

解:令 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$,$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3)$. 因为 $|\boldsymbol{A}|\neq 0$,所以 $\boldsymbol{A}$ 可逆,因此 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 线性无关. 又由于 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 中向量的个数等于向量的维数,所以它是 $\mathbb{R}^3$ 的一组基.

因为 $\boldsymbol{A}$ 可逆,因此 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{B}$ 有唯一解.

$$(\boldsymbol{A}\,\vdots\,\boldsymbol{B})=\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&3&-7&0&-3&-1\\2&1&1&5&-11&3\\-1&0&2&-3&6&2\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&3&-7&0&-3&-1\\0&-5&15&5&-5&5\\0&3&-5&-3&3&1\end{array}\right)$$

$$\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&0&2&3&-6&2\\0&1&-3&-1&1&-1\\0&0&4&0&0&4\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&0&2&3&-6&2\\0&1&-3&-1&1&-1\\0&0&1&0&0&1\end{array}\right)\sim\left(\begin{array}{ccc:ccc}1&0&0&3&-6&0\\0&1&0&-1&1&2\\0&0&1&0&0&1\end{array}\right)$$

即
$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)\begin{pmatrix}3&-6&0\\-1&1&2\\0&0&1\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)\boldsymbol{X}$$

所以
$$\boldsymbol{\beta}_1=3\cdot\boldsymbol{\alpha}_1+(-1)\cdot\boldsymbol{\alpha}_2+0\cdot\boldsymbol{\alpha}_3$$
$$\boldsymbol{\beta}_2=(-6)\cdot\boldsymbol{\alpha}_1+1\cdot\boldsymbol{\alpha}_2+0\cdot\boldsymbol{\alpha}_3$$
$$\boldsymbol{\beta}_3=0\cdot\boldsymbol{\alpha}_1+2\cdot\boldsymbol{\alpha}_2+1\cdot\boldsymbol{\alpha}_3$$

即 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 下的坐标向量分别为 $(3,-1,0)^{\mathrm T}$, $(-6,1,0)^{\mathrm T}$ 和 $(0,2,1)^{\mathrm T}$.

显然,$|\boldsymbol{B}|\neq 0$,所以 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 也线性无关,因此 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 也是 $\mathbb{R}^3$ 的一组基,而且易知 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 在 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 下的表示矩阵为 $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{X}^{-1}=\dfrac{1}{3}\begin{pmatrix}-1&-6&12\\-1&-3&6\\0&0&3\end{pmatrix}$.

定义 2.1.4　设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 和 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 是 n 维向量空间 V 的两组基,且存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$,使得

$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P}\tag{2.1.2}$$

则称式(2.1.2)为**基变换公式**(base transformation formula),称矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 的**过渡矩阵**(transition matrix),且有

$$\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)^{-1}(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\tag{2.1.3}$$

由此定义可知,在 n 维向量空间 V 中,任意 n 个线性无关的向量都可以作为 V 的一组基. 显然,对于不同的基,同一个向量的坐标是不同的. 比如在例 2.1.7 中,$\boldsymbol{\beta}_1$ 在 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_3$ 下的坐标向量为 $(1,0,0)^{\mathrm T}$,与它在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 下的坐标向量 $(3,-1,0)^{\mathrm T}$ 明显不同.

那么,随着基的改变,同一个向量的坐标如何改变呢?

事实上,若有 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{x}$ 及 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\beta}_1,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{y}$,由矩阵 $(\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$ 可逆及式(2.1.2)可知

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)^{-1}\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)^{-1}(\boldsymbol{\beta}_1, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$$

定理 2.1.1　设 n 维向量空间 V 中元素 $\boldsymbol{\alpha}$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 与基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 下的坐标向量分别为 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{P}$ 为基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的过渡矩阵，则成立**坐标变换公式**(coordinate transformation formula)：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{y} \text{ 或者 } \boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x} \tag{2.1.4}$$

回到齐次线性方程组 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，显然，有如下解的结构定理：

定理 2.1.2　设 $\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \cdots, \boldsymbol{\xi}_t$ 为 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的解向量(简称解)，则 $\boldsymbol{\xi} = C_1\boldsymbol{\xi}_1 + C_2\boldsymbol{\xi}_2 + \cdots + C_t\boldsymbol{\xi}_t$ 也是 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的解.

这说明，系数矩阵为 $m \times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的解集

$$N(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\}$$

也是向量空间，称为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的**解空间**或矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**零空间**. 请注意，提到解空间时我们针对的是方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，而说到零空间时针，对的则是矩阵 $\boldsymbol{A}$.

定理 2.1.3　齐次线性方程组 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的解空间 $N(\boldsymbol{A})$ 的维数为 $\dim N(\boldsymbol{A}) = n - r(\boldsymbol{A})$，其中 $r = r(\boldsymbol{A})$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩(rank)，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行阶梯矩阵 $\boldsymbol{H}_A$ 或行最简矩阵 $\boldsymbol{U}_A$ 中非零行的个数，也就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列(行)向量组的极大无关组中的向量个数.

在例 2.1.1 中，$n - r(\boldsymbol{A}) = 5 - 2 = 3$，因此原方程组的解空间 S 是 3 维的，这样我们只能选出 3 个解向量 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_3$，它们构成解空间的一组基，称为原方程组的一个**基础解系**(fundamental system of solutions).

2.1.3　向量空间的历史：前传

向量空间的历史屡屡会给我们一种“知识考古学”的韵味. 不仅在各种“话语”的转换间，常常出现历史的“断裂(rupture)”，而且从考古学的本意看，先人们在屡屡挖到向量空间这座宏伟建筑的墙角之后，历经艰辛，才最终弄明白了登堂入室的门径所在.

向量又称矢量，英文为 vector，是现代数学、物理学中的重要概念. 为免术语混乱之弊，一般数学称向量，物理称矢量. “vector”一词，源自拉丁文“vehere”，意为携带、搬运或运输，这显然与物理学有关. 事实上，最早期的向量概念就来自物理学中的速度、力等概念. 速度和力都是向量，既有大小又有方向，满足平行四边形法则. 亚里士多德(Aristotle，公元前 384－公元前 322 年)的书中就提到了速度的平行四边形法则，牛顿(Isaac Newton，1643－1727)则把力的平行四边形法则作为其运动定律的推论.

随着力学的不断发展，借助于笛卡尔(Rene Descartes，1596－1650)坐标系，向量的概念被从质点力学扩充到其他力学对象. 欧拉将刚体力学中用几何描述定义的力矩公式，即力矩是力强度与共同垂直于轴和力的作用线的长度之积，坐标化为 $M = fP + gQ + hR$，这里 P、Q、R 分别是关于轴 x、y、z 的力矩，f、g、h 分别是力矩轴与坐标轴夹角的余弦. 显然，这类似于下面的定理：沿给定直线的力可以看成它在三个坐标轴上的投影之和. 泊松(Simeon-Denis Poisson，1781－1840)则在 1808 年的文章里，将质点的力矩视为一个平面，它关于某固定轴的分量就是它在垂直于该轴的平面上的投影. 他的这种力矩

的几何理论一时广为人知. 之后的比奈(Marie Binet, 1786－1856)在 1814 年给出了刚体动力学中刚体平衡的一般条件：

$$\sum_i F_i^2 + 2\sum_{i>k} F_i F_k \cos(F_i, F_k) = 0; \sum_i M_i^2 + 2\sum_{i>k} M_i M_k \cos(M_i, M_k) = 0$$

其中, F_i 和 M_i 分别表示作用于物体上的力与力矩. 这显然清楚地指出了力与力矩的相似性. 他还首次通过力矩的几何表示给出了转动动量定律. 与此同时, 潘索(Louis Poinsot, 1777－1859)在 1803 年出版的《静力学原理》(*Eléments de statique*)中, 通过引入力偶的概念, 处理了静力学问题. 他的力偶是大小相等、方向相反, 但作用线不在同一直线上的一对力. 这是一个自由矢量, 其大小为力的强度乘以二力作用线间的距离, 方向由右手螺旋法则确定, 并垂直于二力所构成的平面. 他证明了如果用垂直于力偶的平面上的线段表示力偶, 就可以通过平行四边形法则复合两个力偶. 书中最先采用有向线段的几何合成方式处理整个静力学问题, 这使得该书影响深远. 尽管当时力学中普遍地涉及向量, 但其表述却囿于笛卡尔坐标之中, 没有出现现代意义下的简洁的向量形式.

我们再来考察向量空间理论的另一个重要思想来源——位置几何(geometry of situation). 如上所述, 解析几何在力学发展中发挥了重要作用. 事实上, 解析几何直接促成了数学研究对象的彻底变革, 微积分的伟大成功也拜其所赐. 这种几何与代数的“数形结合”使得线性方程组成为最重要的方程类型, 从而凸显了直线在几何中的基础性地位. 同时, 基于曲线的方程来讨论曲线的分类, 也自然引出了对所采用的坐标变换(当时称为线性替换)的各种效果的分析. 再者, 解析几何也具有突破三维的可能性(虽然直到两个世纪后这种可能性才变为现实). 尽管如此, 有些数学家仍对之进行了批评. 主要的指责是几何问题的求解变成了纯粹的数字计算, 完全与传统的欧几里得(Euclid, 约公元前 330 年－前 275 年)几何无关了. 这仿佛宾客在宴席上大快朵颐, 然后告诉一边呆望着的主人:“这是……那是……味道好极了!”还有, 在使用解析几何方法求解几何问题时, 坐标系统的选取是很自由的, 但不同坐标系统的计算量却可能存在霄壤之别. 在这些批评中, 莱布尼兹(Gottfried Wilhelm Leibniz, 1646－1716)的最有建设性. 在 1679 年写给惠更斯(Christiaan Huygens, 1629－1695)的信及随信附上的论文中(发表于 1833 年), 他认为,“代数仅仅能表达未定的数或量值, 不能直接表达位置、角度和运动”, 因此“它(代数)没有给出最简洁的方法或者几何上最优美的结构”. 他进而提出了另一种分析,“这种分析明显地是几何的或者是线性的, 并且能像代数表达量值一样直接表达位置(situation).”通过这种分析可以“用字符来表达图形和运动, 就像通过代数来表达数和量一样”. 这种分析的价值在于“不需要大量的乘法, 也不需要添加令人困惑的太多的点和线”, 而且“通过这种方法, 人们可以像处理几何一样处理力学”. 不过莱布尼兹所描述的系统绝不意味着他发现了哪怕最原始的向量分析, 尽管他正在寻找与之类似的东西.

在莱布尼兹的信及论文首次发表后不久, 为了鼓励大家进一步发展他的系统, 有人专门设立了一项奖金, 获奖者是格拉斯曼(Hermann Günter Grassmann, 1809－1877, 见图 2－1), 尽管他在此之前已经创造了自己的系统. 在 1847 年写给圣维南(Adhémar Jean Claude Barré de Saint-Venant, 1797 －1886)的信中, 他写道:“我在那一年(1832 年)构思了两条或更多条线的几何的和与差, 还有两条或三条线的几何积的第一个思想.”后来在

1844 年出版的《线性扩张论》(*Die Lineale Ausdehnungslehre*，见图 2-2)中，他详细地阐明了其思想来源：①对几何中负数的考虑，如把距离 AB 和 BA 看成是相反的量，这样无论 A、B、C 三点是否共线，都有 $AB+BC=AC$；②从父亲那里获得的几何积的思想，例如将长方形及平行四边形看成相邻两边的乘积，这里既要考虑两边的长度，也要考虑其方向. 这样两向量的和乘以与它们共面的向量时，结果与用此共面向量分别乘以原来的两向量，再把积相加的结果相同.



图 2-1　格拉斯曼(1809—1877)

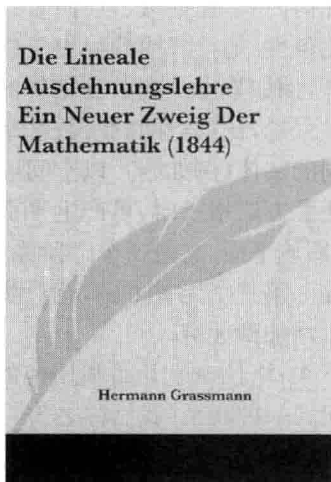


图 2-2　德文版《线性扩张论》

格拉斯曼申请了科学考试委员会主持的考试，并在 1840 年提交了论文"潮汐理论(Theorie der Ebbe und Flut)". 在文中，他将自己已使用过的几何分析(geometrical analysis)方法，运用到对潮汐的研究中. 在用方程 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}\doteq \text{const}$ (这里 $\doteq$ 表示两边几何上相等，即速度在数值和方向上保持不变)表示惯性定律之后，他证明了"几何加减法"的交换律和结合律. 他是最先那批意识到这些运算律以及乘法分配律的全部意义的学者之一. 然后他讨论了向量微积分学，将惯性定律重述为 $\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t^2}\doteq \mathbf{0}$，并指出这个方程表示三个常微分方程. 他还证明了共面的三个向量的积为 0、左右分配律以及向量的几何积的反交换律，并将几何积表达为"线的长度的积乘以它们之间夹角的正弦(带符号)". 这些结果显然与向量的叉积很类似，主要的区别是几何积的结果不是向量，而是有向面积. 尽管这些几何概念以一种普遍和简单的方式确定了力学概念，但他纯粹是从几何的基础上得到它们的. 格拉斯曼的系统不仅是第一个重要的向量分析系统，而且是正在喷薄而出的新代数中的主要工作. 这种新代数的革命性本质堪与非欧几何相媲美. 遗憾的是这份 200 多页的论文，拥有绝对话语权的审稿人只看了 5 天！我们就这样与新代数擦肩而过. 因为等到此文正式发表的 1911 年，黄花菜早凉了.

可是格拉斯曼已经走得更远. 4 年后，在《线性扩张论》的前言中，他写道："(本书中的)这种分析并没有涉及以前我在几何中发现的那种分析……几何只不过是其中的一个特殊应用. ""几何与自然中的某个事物即空间有关……一定存在数学的一个新的分支，

它以一种类似于几何的纯抽象的方式产生，而且难免会涉及空间.”他明确地指出，这种分析的内容“除去了三维空间的限制”. 接下来，他给出了自己的哲学思想. 他认为：“纯数学是一门关于通过思考产生的特别存在的科学. 在这种意义下的特别存在，我们称之为思想形式，或简称为**形式**(form). **纯数学就是关于形式的理论.**”格拉斯曼相信他已经发现了这样一种纯粹的形式系统，它高于几何，并且独立于几何以及当时已知的所有数学. 这种系统是一种**泛代数**(universal algebra)，其中的形式不必具备实际内容，但需要时可赋予其几何内容，比如数、点、向量、有向面积等. 显然，他的形式理论具有令人吃惊的普遍性和抽象性. 他接着明确提出了四个概念：离散与连续、相等和不等，并用它们来形成所有数学，例如算术是离散且相等的、函数理论是连续且相等的. 连续且不等的，就是他的线性扩张论，比如空间的维数就是“不等”的，而其中的元素(例如点)的“连续”变化可产生不同的实体(例如线). 以空间理论为例，格拉斯曼进而指出，当生成元素从两个不同方向以任意方式增长时，可产生平面上的所有元素. 按这种方式产生的所有点构成一个新元素，即该平面. 它是一个二阶系统，是依赖于两个原始方向的无穷多个方向的集合. 如果再加上第三个无关方向，就产生了三阶的无限空间. 然而，在线性扩张论中，方向的数目可以增加到无穷.

接下来，格拉斯曼开始利用他的哲学思想构造形式系统. 他首先定义了两个形式 a 与 b 之间的一种联系(我们称之为“加法”，并采用现代的记号，后同)，得到新形式 $a+b$，它满足方程：

$$a+b=b+a,(a+b)+c=a+(b+c)=a+b+c.$$

然后，他定义了的 a 与 b 的“减法”，得到的 $a-b$ 满足 $(a-b)+b=a$，而且成立下面的方程：

$$a-b-c=a-c-b=a-(b+c),a-(b-c)=a-b+c$$

他进一步给出了“零”形式(记为 0)，满足 $0=a-a$，以及 0 与 b 的“减法”，即 b 的“负”形式 $-b$. 他还定义了形式 a 与 b 的“乘法” $a\times b$，满足 $(a+b)\times c=a\times c+b\times c$，以及除法.

到目前为止，我们还只是管窥了一下格拉斯曼的思想. 事实上，他在书中还给出了向量的外积、内积、夹角、长度、框积等概念，涉及 n 维向量空间、子空间、张成集、线性无关、基、维数等概念. 过于哲学的前言(光这就让一批数学家踟蹰不前)，许多刻意挑选的术语(连许多德国数学家都闻所未闻)，以及当时大多数数学家难以理解的内容，使得这本书晦涩难懂，少人问津. 尽管惊呼“格拉斯曼是个伟大的天才”的哈密顿(Sir William Rowan Hamilton，1805—1865)自己也是伟大的天才(13 岁时就通晓 13 种语言)，但连他也说，为了要阅读格拉斯曼，或许他必须学会抽烟. 虽然 1862 年格拉斯曼出版了修订版，其中大量压缩了哲学性的叙述，但仍然没能使得自己的思想更好地被人了解.

“其曲弥高，其和弥寡.”天才的思想往往都是超越时代的，格拉斯曼也没能幸免. 直到 1920 年左右，E. 嘉当(Elie Joseph Cartan，1869—1951)才在创设外代数(也称格拉斯曼代数)和微分几何的基础时，引入了基础性的格拉斯曼流形. “墙里开花墙外香”，墙里的向量理论没能氤氲到花香，自然就会误入歧途. 与此同时，关于复数的研究工作却阴差阳错地促成了向量空间理论的发展. 正所谓“种瓜得豆”.

尽管德摩根(Augustus De Morgan,1806—1871)在答复哈密顿的信中,认为复数的历史要追溯到印度人,但目前大家公认的是,卡尔达诺(Girolamo Cardano,1501—1576)在其 1545 年出版的《大术》(*Ars Magna*)中,就遭遇方程的复根,并形式上处理过复数运算. 之后许多数学家一直苦苦寻求复数的几何意义,以赋予复数合法地位. 沃利斯(John Wallis,1616—1703)通过几何作图,曾洞察到虚数的意义在于垂直方向. 最终拨开迷雾的是韦塞尔(Caspar Wessel,1745—1818)、阿尔冈(Jean Robert Argand,1768—1822)和高斯等人.

作为丹麦皇家科学院的一名测绘员,韦塞尔于 1797 年提交了论文"论方向的解析表示",并于两年后发表在科学院的院刊上. 在文中,他一开始就开宗明义:"怎样解析地表示方向?"接着,他通过平行四边形法则,定义了有向线段的加法. 他举例说明对一个顶点为 a,b,c,d 的四边形,有 $ab+bc+cd+da=0$. 他真正的革新在于接着给出的有向线段乘积的几何定义. 首先,两因子与正单位(即 $a\cdot 1+b\sqrt{-1}$ 中的 1)共面(也与积共面);其次,积的长度等于两因子的长度之积;最重要的,积的方向角(正单位的方向角为 0°)等于两因子的方向角之和. 接下来,他写道:"设 $+1$ 表示正的直线单位,$+\varepsilon$ 表示另一种单位,它与正单位有共同起点且垂直于正单位,那么 $+1$ 的方向角为 0°,-1 的方向角为 180°,$+\varepsilon$ 的方向角为 90°,$-\varepsilon$ 的方向角为 -90° 或 270°. 根据规则,积的方向角等于因子方向角之和,我们有 $(+1)(+1)=+1$, $(+1)(-1)=-1$, $(-1)(-1)=+1$, $(+1)(+\varepsilon)=+\varepsilon$, $(+1)(-\varepsilon)=-\varepsilon$, $(-1)(+\varepsilon)=-\varepsilon$, $(-1)(-\varepsilon)=+\varepsilon$, $(+\varepsilon)(-\varepsilon)=+1$, $(-\varepsilon)(-\varepsilon)=-1$. 由此显然可知 ε 就是 $\sqrt{-1}$. "接着他指出,平面上的任意有向线段都可以解析地写成 $a+\varepsilon b$ 和 $r(\cos v+\varepsilon\sin v)$,并证明了这种表达式如何相乘、相除及求幂. 按他的解释,$\varepsilon(a+\varepsilon b)=-b+\varepsilon a$,即有向线段 $a+\varepsilon b$ 被逆时针旋转为 $-b+\varepsilon a$,因此 ε 即 $\sqrt{-1}$ 还是一个旋转算子. 正如有个笑话所说:"您拨打的电话号码是虚号(虚数),如果您想拨到实号(实数),请把您的电话旋转 90°,再试一下." 也就是说,"利用旋转的解释什么也没有证明". 我们将在 2.4.3 小节再对此予以详细解释.

虽然韦塞尔还把他的思想进一步地拓展到三维空间,但历史再次显露出它残酷无情的本色. 韦塞尔用丹麦文写的论文读者寥寥无几. 直到百年后的 1895 年,该文才被重新发现,并译成法文重新发表. 实际上,最终让大家接受复数的是伟大的高斯. 在 1831 年的一篇论文中,高斯以他特有的简洁,给出了复数 $m+ni$ (m,n 为整数或零)的一种平面表示,并阐述了复数的几何加法与乘法. 只是在注释中,他指出,这种思想早就隐含在他 1799 年做出的代数基本定理的证明中.

复数的几何表示仅限于平面向量,人们自然希望能有一个三维类似物,可以用来处理空间向量. 第一个发现这种"超复数"的是哈密顿. 1835 年,哈密顿发表了"代数作为纯时间的科学"一文,将他早在 1827 年就认定的"**代数就是时间的科学**"的思想明晰化. 他认为,既然**几何是空间的科学**,那么代数就是时间的科学,时间的基本思想是那些有居先、后来和同时三种关系的次序和序列. 在该文的第三部分(写于 1833 年),他建立了有序实数偶 (a,b),定义了数偶的运算,并证明了 (a,b) 等价于复数 $a+bi$. 他写道:"在单个数的系统中,符号 $\sqrt{-1}$ 是荒唐的,表示的是'不可能的数',或者仅仅是一个'虚数',但是在数偶理论中,同样的符号 $\sqrt{-1}$ 是有意义的,代表了一种可能的抽象,或者一个数

偶，即数偶 $(-1,0)$ 的主平方根 $(0,1)$ ……对无论怎样的任意数偶 (a_1,a_2)，都有 $(a_1,a_2)=a_1+a_2\sqrt{-1}$. ”他在文末指出，只要将代数看成纯粹时间的科学，那么那些通常被认为仅仅是符号的、难以解释的表达式，就逐渐变成思想，并获得现实和意义. 他还希望今后能以这种观点发展一种三元组理论. 经过“八年抗战”，他于 1843 年发明了四元数，并刻在了勃洛翰桥(Brougham Bridge，见图 2-3)上.

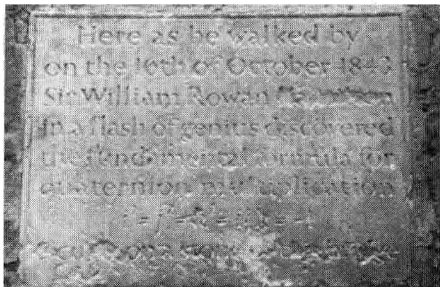


图 2-3　四元数圣地勃洛翰桥

哈密顿认为，他的新数 $a+bi+cj$ 必须满足下列六条性质(这些性质复数都具备)：

(1)加法和乘法的结合律；

(2)加法和乘法的交换律；

(3)分配律；

(4)除法；

(5)模律，即两个新数乘积的模等于它们模的乘积，这里 $a+bi+cj$ 的模为 $a^2+b^2+c^2$；

(6)在三维空间里要有一个有意义的解释.

考虑

$$(a+bi+cj)^2=(a^2-b^2-c^2)+(2ab)i+(2ac)j+(bc)ij+(bc)ji \tag{2.1.5}$$

其中，利用了 $i^2=j^2=-1$. 显然式(2.1.5)的右边也必须是一个新数，因此可令 $ij=0$，或者令 $ij=-ji$. 对于模律的成立也有类似的要求. 再考虑两个不同的新数的乘积，若仍设 $ij=-ji$，则有

$$(a+bi+cj)(x+yi+zj)^2=(ax-by-cz)+(bx+ay)i+(cx+az)j+(bz-cy)ij \tag{2.1.6}$$

显然，没能去掉乘积中的 ij 项. 若令 $ij=0$，虽然能够实现这个目的，但注意到乘积的模为

$$(a^2+b^2+c^2)(x^2+y^2+z^2)=(ax-by-cz)^2+(bx+ay)^2+(cx+az)^2+(bz-cy)^2 \tag{2.1.7}$$

其中，乘积中 ij 项的系数 $bz-cy$ 又以平方形式出现，因此令 $ij=0$ 也行不通. 注意到式(2.1.7)中模的乘积是 4 个平方之和，因此只有令 ij 为未知的 k，将新数扩充为包含 4 个分量，并且放弃乘法的交换律，才能基本实现六个要求. 至此，哈密顿的四元数就是形如 $a+bi+cj+dk$ 的数，其中 i,j,k 分别是 x,y,z 轴的单位向量，并且 $i^2=j^2=k^2=-1$(见图 2-4)，$ij=-ji=k$, $jk=-kj=i$, $ki=-ik=j$. 他还指出，一个四元数 $a+bi+cj+dk$ 可以看成其标量(scalar)部分 a 与向量(vector)部分 $bi+cj+dk$ 之和. 显然，向量部分可用空间中的有向线段来表示，问题是，标量部分的几何意义是什么呢? 两者的加法又如何解释呢? 这些问题也让哈密顿十分纠结.

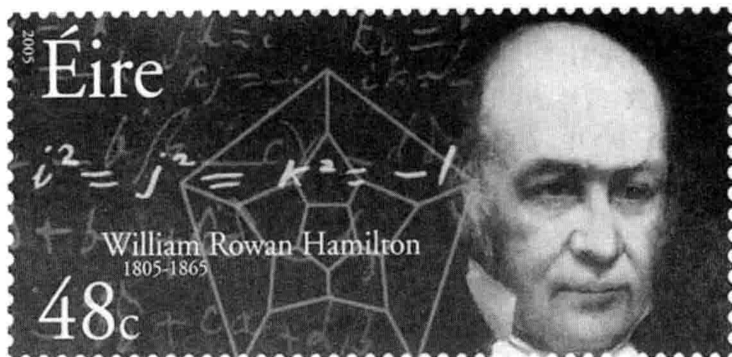


图 2-4　爱尔兰发行的纪念邮票

尽管四元数存在致命的缺陷，但它却给代数学的发展带来了革命性的影响. 与此同时，随着更加革命性的非欧几何和群论思想的传播，人们逐渐认识到：代数学的公理是可以改变的，不仅交换律，其他运算规则，如结合律等，也可以不满足，因此可以自由地构造各种各样的代数，进而使得“**大量看似不同问题的领域和结果之间的联系第一次被发现了**”. 到了大约 1870 年，n 维空间的概念已变成了年轻一代优秀数学家的必备知识. 艾勃特(Edwin A. Abbott，1838－1926)写于 1884 年的政治讽刺小说《平面国》(*Flatland*，2007 年被搬上银幕)，描述了二维国及其社会结构，以及正方形 A 的奇异经历. 书中对维数的文学化描述，充分说明当时对空间维度的探索已经广为人知. 当然，更有名的是威尔斯(Herbert George Wells，1866－1946)的《时间机器》，该书出版的 1895 年甚至被称为“科幻小说诞生元年”. 纵观历史，我们不禁要感概：令人无法自拔的，不仅有牙齿和爱情，还有伟大平凡而美丽的数学. 欲知详情如何，且待后文分解.

2.2　线性空间

线性空间是向量空间在元素和线性运算上的推广和抽象，它的元素可以是向量、矩阵、多项式、函数等，它的线性运算既可以是我们熟悉的一般运算，也可以是各种特殊的运算. 向量空间中的线性组合、线性相关、线性无关、基、坐标等定义和结论都可以推广到一般线性空间，尤其是坐标，能够将一般线性空间的问题转化成向量空间的问题，是一个十分有力的工具.

2.2.1　什么是线性

什么是线性？这是个庞大的问题. 我们先通过线性函数来加以说明.

众所周知，数学研究的是现实世界中的数量关系和空间形式(当然也有人认为数学是关于模式的科学). 两变量 x，y 之间最简单的关系，莫过于平移和正比例关系，即 $y=x+b$ 和 $y=kx$ (k 为正比例系数)，复合在一起，就得到一元线性函数 $y=kx+b$ ($k\neq 0$)，几何上就是平面中的一条直线，这就是它何以被形象地称为“线性”函数的缘故. 特别地，当 $b=0$ 时所得的正比例函数 $y=kx$ 又称为一元线性齐次函数，这里的“齐次”指的是表达式中每项里变量出现的次数都整齐划一、均为一次. 从运算上看，$y=kx+b$ 涉及的运

算仅为加法和乘法,因此是最简单、最重要的函数.事实上,高等数学中的一个核心思想就是(局部)线性化,即以直代曲.另外,线性函数也具有很多有趣的性质,比如,线性函数的反函数仍为线性函数、线性函数的复合函数仍为线性函数,等等.

在表达式 $y=kx+b$ 中,b 的作用并不重要,因为它仅仅改变了起始点,即将直线平移了一下.真正重要的参数是 k,因为当我们考察增量 Δy 与 Δx 的关系时,由于

$$\Delta y=[k(x+\Delta x)+b]-(kx+b)=k\Delta x$$

故 Δy 是 Δx 的线性齐次函数,b 不起作用.这也说明了高等数学中导数何以如此重要,因为从几何上看,切点处的导数 $f'(x)$ 就是过切点的切线的斜率 k.问题是,何以 $y=kx$ 中 x 与 y 会成正比例变化呢?答案是线性齐次函数 $y=kx$ 具有可加性.

定义 2.2.1 设函数 $f(x)$ 的定义域为 D,若对任意 $x,y\in D$,都有 $x+y\in D$,以及

$$f(x+y)=f(x)+f(y) \tag{2.2.1}$$

则称函数 $f(x)$ 具有**可加性**,并称式(2.2.1)为可加性方程.

易知一元线性函数 $y=f(x)=kx$ 具有可加性.而且当自变量扩大 k 倍时,由归纳假设,有

$$f(kx)=f[x+(k-1)x]=f(x)+f[(k-1)x]=f(x)+(k-1)f(x)=kf(x)$$

即函数值也扩大了同样的 k 倍.

上述的推理显然不严密,下面我们给出严格的证明.

定理 2.2.1 定义域内任意实数 a,b 都满足可加性方程(2.2.1)的唯一连续函数 $f(x)$ 是一元齐次函数 $f(x)=kx$,其中 $k=f(1)$ 是任意常数.

证明: $f(0)=f(0+0)=f(0)+f(0)=2f(0)$,所以 $f(0)=0$,又 $0=f(0)=f(-1+1)=f(-1)+f(1)$,故 $f(-1)=-f(1)$.对正整数 m,类似可证 $f(m)=mf(1)$,$f(-m)=-mf(1)$.

当 $x=\frac{1}{n}$(n 为正整数)时,由 $f(1)=f(\frac{1}{n}+\frac{1}{n}+\cdots+\frac{1}{n})=nf(\frac{1}{n})$ 可知 $f(\frac{1}{n})=\frac{1}{n}f(1)$,同样可知 $f(-\frac{1}{n})=-\frac{1}{n}f(1)$;当 $x=\frac{m}{n}$(m,n 为正整数)时,有 $f(\frac{m}{n})=f(\frac{1}{n}+\frac{1}{n}+\cdots+\frac{1}{n})=mf(\frac{1}{n})$,此即 $f(\frac{m}{n})=\frac{m}{n}f(1)$.

当 x 为无理数时,由实数系统的连续性与完备性,存在极限为 x 的有理数列 $\{x_n\}$,即有 $\lim\limits_{n\to\infty}x_n=x$.由于已证 $f(x_n)=x_nf(1)$,两边取极限,即得 $\lim\limits_{n\to\infty}f(x_n)=f(1)\lim\limits_{n\to\infty}x_n=f(1)x$.注意到函数 $f(x)$ 是连续函数,因此 $f(1)x=\lim\limits_{n\to\infty}f(x_n)=f(\lim\limits_{n\to\infty}x_n)=f(x)$.令 $k=f(1)$,则 $f(x)=kx$.证毕.

综上可知,可加性是连续函数成为一元线性齐次函数的充要条件,因此它是一元线性齐次函数的特征性质.显然,其他函数就不具备可加性,比如 $f(x)=x^2$、$f(x)=\ln x$ 和 $f(x)=\sin x$ 都是非线性函数,因为 $(x+y)^2\neq x^2+y^2$,$\ln(x+y)\neq\ln x+\ln y$,$\sin(x+y)\neq\sin x+\sin y$.

推广到 n 个自变量的情形,我们称 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=k_1x_1+k_2x_2+\cdots+k_nx_n+b$

为 n 元线性函数，当 $b=0$ 时，称 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=k_1x_1+k_2x_2+\cdots+k_nx_n$ 为 n 元线性齐次函数. 经过类似的分析可知 n 元线性齐次函数更加重要，而且它也具有可加性，即

$$f(x_1+y_1,x_2+y_2,\cdots,x_n+y_n)=f(x_1,x_2,\cdots x_n)+f(y_1,y_2,\cdots,y_n) \tag{2.2.2}$$

注意到 n 元线性齐次函数是 n 个一元线性齐次函数 $f(x_i)=k_ix_i\ (i=1,2,\cdots,n)$ 之和，因此，如果只让某个自变量 x_i 取得增量 Δx_i（其他自变量保持不变），则引起的因变量增量为 $\Delta f=k_i\Delta x_i$，即 Δf 与 Δx_i 成正比例. 这也意味着，若把自变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 看做影响函数值的独立因素，那么每一个独立因素作用的结果都与它们的大小成正比例，而且各因素作用的总效果等于每个因素单独作用的效果之和. 事实上，通过与前面类似的手法，可以证明 n 元线性齐次函数具有如下的齐次性：

$$f(kx_1,kx_2,\cdots,kx_n)=kf(x_1,x_2,\cdots,x_n) \tag{2.2.3}$$

上面的讨论说明线性关系的要害在于可加性. 对 n 维向量空间 $\mathbb{R}^n$ 而言，情况也大抵如此. 显然，我们对 $\mathbb{R}^n$ 中的“数”（即 n 维向量）定义了“加法”（即向量加法），并且满足如下的交换律和结合律（任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}\in\mathbb{R}^n$）：

(A1)加法交换律：$\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\alpha}$；(A2)加法结合律：$(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})+\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}+(\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma})$.

$\mathbb{R}^n$ 中还有一个特殊的度量基准点被当做坐标原点（即零向量），同时在任何方向上都可以建立数轴，即每个向量都存在反方向，以保证向量在两个相反的方向上都是无限延伸的，这就是说，$\mathbb{R}^n$ 具有下列加法单位元和加法逆元：

(A3)加法单位元，即存在零向量 $\mathbf{0}\in\mathbb{R}^n$，使得 $\boldsymbol{\alpha}+\mathbf{0}=\boldsymbol{\alpha}$；

(A4)加法逆元，即对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^n$，存在 $-\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^n$，使得 $\boldsymbol{\alpha}+(-\boldsymbol{\alpha})=\mathbf{0}$.

对线性齐次函数而言，可加性和连续性可以推导出正比例性，这对于 $\mathbb{R}^n$ 也是类似的. $\mathbb{R}^n$ 中的“乘法”即数乘. 对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}^n$，显然 $2\boldsymbol{\alpha}=(1+1)\boldsymbol{\alpha}=1\boldsymbol{\alpha}+1\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}$. 一般地，$k\boldsymbol{\alpha}$ 就是 k 个 $\boldsymbol{\alpha}$ 之和. 当然，这要求 $\mathbb{R}^n$ 必须先满足下列性质：

(M1)存在数乘的单位元 1，使得 $1\cdot\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}$；

(D1)向量对数的分配律：$(k+l)\boldsymbol{\alpha}=k\boldsymbol{\alpha}+l\boldsymbol{\alpha}$.

由于 $\mathbb{R}^n$ 在每一个方向上都具有比例关系，这意味着它还满足数乘的结合律：

(M2)数乘的结合律：　$k(l\boldsymbol{\alpha})=(kl)\boldsymbol{\alpha}$

最后，考虑向量加法的三角形法则，即若把 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 视为一个三角形，那么放大 k 倍后的 $k\boldsymbol{\alpha},k\boldsymbol{\beta},k(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})$ 不仅仍然构成三角形，而且与原三角形还是相似的，此即 $\mathbb{R}^n$ 还满足下列分配律：

(D2)数对向量的分配律：　$k(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})=k\boldsymbol{\alpha}+k\boldsymbol{\beta}$

2.2.2　线性空间的概念及性质

我们知道，向量是特殊的矩阵，而对所有 $m\times n$ 阶的实矩阵的集合 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 而言，它对矩阵的加法和数乘封闭，并且也满足上述 8 条运算律，因此也是“向量空间”. 当然这里的“向量”已推广到实矩阵！按此思路，我们从元素、运算以及数域上入手，就可将向量空间推广到更一般的线性空间. “原始人”总算进化成“文明人”了.

定义 2.2.2 考虑非空集合 V 及数域 $\mathbb{F}$. 如果对任意 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta} \in V$，都存在唯一的元素 $\boldsymbol{\delta} \in V$ 与它们对应，则称 $\boldsymbol{\delta}$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的**和**，记作 $\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}$. 同时对任意 $k \in \mathbb{F}$及 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，都存在唯一的 $\boldsymbol{\eta} \in V$ 与它们对应，则称 $\boldsymbol{\eta}$ 为 k 与 $\boldsymbol{\alpha}$ 的**数乘**，记作 $\boldsymbol{\eta} = k\boldsymbol{\alpha}$. 如果加法和数乘这两种运算即线性运算不仅封闭（$\boldsymbol{\delta} \in V$ 且数乘 $\boldsymbol{\eta} \in V$），还满足下面 8 条运算律，则称 V 为数域 $\mathbb{F}$上的线性空间(linear space)：

(A1)加法交换律：对任意 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta} \in V$，都有 $\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\alpha}$；

(A2)加法结合律：对任意 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta}$、$\boldsymbol{\gamma} \in V$，都有 $(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha} + (\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\gamma})$；

(A3)加法单位元，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，都存在零元 $\boldsymbol{\theta} \in V$，使得 $\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\alpha}$；

(A4)加法逆元，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，都有存在 $-\boldsymbol{\alpha} \in V$（称为 $\boldsymbol{\alpha}$ 的负元），使得 $\boldsymbol{\alpha} + (-\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\theta}$；

(M1)数乘的单位元，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，都有 $1 \cdot \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}$；

(M2)数乘的结合律，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 以及任意 k、$l \in \mathbb{F}$，都有 $k(l\boldsymbol{\alpha}) = (kl)\boldsymbol{\alpha}$；

(D1)分配律 1，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 以及任意 k、$l \in \mathbb{F}$，都有 $(k + l)\boldsymbol{\alpha} = k\boldsymbol{\alpha} + l\boldsymbol{\alpha}$；

(D2)分配律 2，即对任意 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta} \in V$ 以及任意 $k \in \mathbb{F}$，都有 $k(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}) = k\boldsymbol{\alpha} + k\boldsymbol{\beta}$.

几点说明：

(1)在线性空间 V 的定义中，不仅不再关心元素的特定属性，而且也不关心这些线性运算（即加法和数乘）的具体形式.

(2)在上面的定义中，数域也被推广到了更一般的数域 $\mathbb{F}$(比如有理数域). 当然，本书中数域 $\mathbb{F}$仅指实数域 $\mathbb{R}$ 和复数域 $\mathbb{C}$，此时相应的线性空间分别被称为**实空间**和**复空间**.

(3)在线性齐次函数和 $\mathbb{R}^n$ 中，可从加法运算推导出数乘运算. 但线性空间中的元素未必可取极限，也未必连续，因此我们脱离加法单独定义了数乘. 当然为运算方便，还要求它满足了相应的运算律.

(4)因为向量空间是最特殊的一种线性空间，所以本书有时也将线性空间中的元素形象地称为向量，尤其是在论述线性空间的一般性质时. 从前只有西施和貂蝉才是美女，现在则是美女满大街. 当然，对于元素类型已知的线性空间，我们一般会尽可能说得具体些（比如矩阵、多项式、函数等）. 另外，请读者注意，有些书中是将这两种空间等同看待的.

(5)线性空间是线性代数的最基本概念之一，概括地说，它要求的就是“两种封闭运算和八条运算规律”. 这不禁让人喟叹：“二八佳人，引无数英雄竞折腰.”

思考：为什么会有两条分配律？

例 2.2.1 全体 $m \times n$ 阶的实(复)矩阵组成的集合 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 或 $\mathbb{C}^{m \times n}$，按矩阵的加法和数乘，构成线性空间，称为实(复)**矩阵空间**(matrix space).

例 2.2.2 所有实系数多项式（包括零次多项式即常数）组成的集合 $\mathbb{P}[x]$，按通常的多项式加法和数与多项式的乘法，构成线性空间，称为**多项式空间**(polynomial space). 特别地，次数小于 n 的所有实系数多项式的集合 $\mathbb{P}[x]_n$，按通常的多项式加法和数与多项式的乘法，也构成线性空间. 显然 $\mathbb{R}$ 就是 $\mathbb{P}[x]_1$.

例 2.2.3 所有收敛的实数数列组成的集合 l^∞，按数列极限的加法和数乘，构成线性空间.

例 2.2.4 闭区间 $[a,b]$ 上的所有连续实函数的集合 $\mathbb{C}[a,b]$，按通常的函数加法和数与函数的乘法，构成线性空间，称为**连续函数空间**(continuous function space).

例 2.2.5 闭区间 $[a,b]$ 上的所有 n 阶可微实函数的集合 $\mathbb{C}^n[a,b]$，按通常的函数加法和数与函数的乘法，构成线性空间，称为**可微函数空间**(spaces of differentiable functions). 特别地，闭区间 $[a,b]$ 上的所有无限阶可微实函数的集合 $\mathbb{C}^\infty[a,b]$ 也构成线性空间，称为无限阶可微函数空间.

请读者注意 $\mathbb{C}^1[a,b]$ 与 $\mathbb{C}[a,b]$ 的区别和联系. 我们不妨将 $\mathbb{C}[a,b]$ 宽泛地看成 $\mathbb{C}^0[a,b]$.

例 2.2.6 对任意 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，全体矩阵向量积 $\boldsymbol{Ax}$ (即 $\boldsymbol{A}$ 的列向量组的线性组合)的集合 $R(\boldsymbol{A})$ 构成数域 $\mathbb{R}$ 上的线性空间，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**列空间**(column space)，或与 $\boldsymbol{A}$ 对应的线性变换(详见 2.4 节)的**值域**(range)，即

$$R(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m \mid \boldsymbol{y} = \boldsymbol{Ax}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}\} \tag{2.2.4}$$

例 2.2.7 所有 n 阶常系数线性微分方程的解集 $\boldsymbol{S} = \{y(t) \mid \boldsymbol{\mathcal{L}}(y(t)) = 0\}$ 是 $\mathbb{C}$ 上的线性空间，其中

$$\boldsymbol{\mathcal{L}}(y(t)) = \frac{\mathrm{d}^n y}{\mathrm{d}t^n} + a_{n-1}\frac{\mathrm{d}^{n-1} y}{\mathrm{d}t^{n-1}} + \cdots + a_1\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} + a_0 y \quad (a_0、a_1、\cdots、a_{n-1} \in \mathbb{C})$$

例 2.2.8 设有 $\mathbb{R}$ 上的正实数集 $\mathbb{R}^+$，对任意 $a,b \in \mathbb{R}^+$，规定加法运算为 $a \oplus b = ab$，乘法运算为 $k \otimes a = a^k$，这里任意 $k \in \mathbb{R}$，则 $\mathbb{R}^+$ 按这种加法运算与数乘运算，构成 $\mathbb{R}$ 上的线性空间.

证明：易知 $\mathbb{R}^+$ 对 $\oplus$ 和 $\otimes$ 两种运算封闭，并且对任意 $a,b,c \in \mathbb{R}^+$，有

$$a \oplus b = ab = b \oplus a,$$
$$(a \oplus b) \oplus c = ab \oplus c = (ab)c = a(bc) = a \oplus (bc) = a \oplus (b \oplus c).$$

由 $a \oplus 1 = a \cdot 1 = a$ 可知零元 $\boldsymbol{\theta} = 1$，又 $a \oplus a^{-1} = aa^{-1} = 1 = \boldsymbol{\theta}$，故 a^{-1} 是 a 的(加法)逆元.

显然，当 $k = 1$ 时有 $1 \otimes a = a^1 = a$，而且对任意 $k,l \in \mathbb{R}$ 及 $a,b \in \mathbb{R}^+$，有

$$k \otimes (l \otimes a) = k \otimes (a^l) = (a^l)^k = a^{kl} = (kl)^l \otimes a$$
$$(k+l) \otimes a = a^{k+l} = a^k a^l = a^k \oplus a^l = k \otimes a \oplus l \otimes a$$
$$k \otimes (a \oplus b) = k \otimes (ab) = (ab)^k = a^k b^k = a^k \oplus b^k = k \otimes a \oplus k \otimes b$$

证毕.

例 2.2.9 设有 $\mathbb{R}$ 上的集合 $V = \{\boldsymbol{\alpha} = (\xi_1, \xi_2) \mid \xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}\}$，对 V 中的任意元素 $\boldsymbol{\alpha} = (\xi_1, \xi_2)$ 和 $\boldsymbol{\beta} = (\eta_1, \eta_2)$ 以及任意 $k \in \mathbb{R}$，规定如下的加法 $\oplus$ 和数乘运算 $\otimes$：

$$\boldsymbol{\alpha} \oplus \boldsymbol{\beta} = (\xi_1 + \eta_1, \xi_2 + \eta_2 + \xi_1\eta_1), k \otimes \boldsymbol{\alpha} = (k\xi_1, k\xi_2 + \frac{1}{2}k(k-1)\xi_1^2)$$

则 V 在这两种运算下构成线性空间.

以上两个例题说明线性空间定义中的加法和数乘仅仅是对形式运算的一种约定俗

成的称呼而已，对具体问题，我们完全可以给出自己的规定. 我们再次强调：线性空间中的元素可以是向量、矩阵、多项式、函数等，其中的线性运算可以“任意”指定，而且同一个线性空间还可以指定不同的线性运算(例 2.2.9 中的 V 显然就是 $\mathbb{R}^2$)，难怪这个“二八佳人”迷倒了“无数英雄豪杰”.

例 2.2.10　非齐次线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$(这里 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$)的解集

$$V=\{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{x}=\boldsymbol{\eta}+C_1\boldsymbol{\alpha}_1+C_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+C_{n-r}\boldsymbol{\alpha}_{n-r}\} \tag{2.2.5}$$

不构成线性空间，这里 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-r}$ 是对应齐次方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的一组基础解系，$\boldsymbol{\eta}$ 为 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的一个特解.

解：显然 $\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\eta}$ 对加法不封闭，因为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\eta})=2\boldsymbol{A\eta}=2\boldsymbol{b}\neq\boldsymbol{b}$，即 $\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\eta}\notin V$.

例 2.2.11　所有 $n\,(n\geqslant 1)$ 次实系数多项式的集合

$$V=\{f(t)\mid f(t)=a_0+a_1t+\cdots+a_nt^n,a_0,a_1,\cdots,a_n\in\mathbb{R},a_n\neq 0\}$$

按通常的多项式加法和数乘运算，不构成 $\mathbb{R}$ 上的线性空间.

解：易知 V 对加法不封闭，例如对 $f(t)=t^n$，$g(t)=1-t^n$，有 $f(t)+g(t)=1\notin V$.

数据处理中，对数坐标非常有用，但它却不是线性的. 例如量度地震的里氏震级 $\lg I$ 每增加 1 级，地震释放出的能量强度就增大 10 倍. 还有颜色空间 RGB，虽然我们以三原色即红色 $(i,0,0)$、绿色 $(0,j,0)$ 和蓝色 $(0,0,k)$ ($i,j,k=0,1,2,\cdots,255$)为颜色空间的基，但该空间里显然没有负向量，而且基不能任意选取，所以颜色空间也不是线性空间.

可以证明，数域 $\mathbb{F}$上的线性空间 V 还具有下列性质：

(A5)零元 $\boldsymbol{\theta}$ 是唯一的；

(A6)每个元素的负元是唯一的；

(A7)当 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\gamma}$ 时，必有 $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\gamma}$；

(M3) $0\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$，$k\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}$；

(M4)当 $k\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$ 时，必有 $k=0$ 或 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$.

2.2.3　线性空间的基、坐标及其变换

向量空间中向量组的线性组合、线性表示、线性相关与线性无关、等价、极大无关组、秩以及向量空间的基、坐标、维数等概念和结论，都可以自然地推广到线性空间. 这里我们仅关心一些易混淆的地方，其余不再赘述.

例 2.2.12　向量空间 $\mathbb{C}$ 是实数域 $\mathbb{R}$ 上的二维空间，其基可取为 $\{1,i\}$，即

$$\mathbb{C}=\mathrm{span}(1,i)=\{a\cdot 1+b\cdot i,a、b\in\mathbb{R}\}$$

同时，向量空间 $\mathbb{C}$ 也是复数域 $\mathbb{C}$ 上的一维空间，其基可取为 $\{1\}$，即

$$\mathbb{C}=\mathrm{span}(1)=\{k\cdot 1,k\in\mathbb{C}\}$$

例 2.2.13　对于例 2.2.8 中的线性空间 $\mathbb{R}^+$. 设有某个 $a\in\mathbb{R}^+$ 且 $a\neq 1$，由于对任意 $b\in\mathbb{R}^+$，由对数恒等式 $b=a^{\log_a b}$，都存在唯一的 $k=\log_a b\in\mathbb{R}$，使得 $b=a^k=$

$k \otimes a$，因此 $\mathbb{R}^+$ 的基可取任意非 1 的正数 a，即线性空间 $\mathbb{R}^+$ 的维数为 1.

定理 2.2.2　**(基的扩张定理)**数域 $\mathbb{F}$上的 n 维线性空间 V 中，任意一个线性无关组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ $(r=1,2,\cdots,n)$ 都可以扩充成 V 的一组基.

证明:由基的定义可知必要性成立，下面给出充分性的证明.

如果 $r=n$，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 已是 V 的一组基，结论得证；如果 $r<n$，令

$$W=\operatorname{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r)$$

则必有 $\boldsymbol{\alpha}_{r+1}\in V$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_{r+1}\notin W$，使得 $\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1}$ 线性无关，否则对任意 $\boldsymbol{\beta}\in V-W$，可知 $\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\beta}$ 线性相关，即 $\boldsymbol{\beta}\in W$，这与 $\boldsymbol{\beta}\in V-W$ 矛盾.

如果 $r+1=n$，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1}$ 就是 V 的一组基，结论亦得证. 如果 $r+1<n$，则更新 W 为 $W=\operatorname{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1})$，重复上述做法，可找出 $\boldsymbol{\alpha}_{r+2}\in V$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_{r+2}\notin W$，使得 $\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1},\boldsymbol{\alpha}_{r+2}$ 线性无关.

依次下去，由于 n 的有限性，最终必可得 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$. 证毕.

基的扩张定理给我们提供了寻找有限维线性空间的基的常规方法，也说明了基不是唯一的. 但一旦确定了基，元素的坐标却是唯一的.

定理 2.2.3　数域 $\mathbb{F}$上的线性空间 V 中，任意元素在给定基下的坐标是唯一的.

例 2.2.14　已知多项式空间 $\mathbb{P}[x]_3$.

(1)证明：$f_1=1,f_2=x,f_3=x^2$ 是 $\mathbb{P}[x]_3$ 的一组基(称为 $\mathbb{P}[x]_3$ **的标准基**)；

(2)求多项式 $f=3+2x+4x^2$ 在标准基下的坐标向量 $\boldsymbol{x}$；

(3)证明：$g_1=1,g_2=x-2,g_3=(x-2)^2$ 也是 $\mathbb{P}[x]_3$ 的一组基，并求 f_1,f_2,f_3 及 f 在此基下的坐标向量 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3$ 及 $\boldsymbol{y}$.

证明:(1)易知 $f_1=1,f_2=x,f_3=x^2$ 线性无关，因为当 $k_1f_1+k_2f_2+k_3f_3=0$ 时，由多项式性质可知 $k_1=k_2=k_3=0$. 另外，对 $\mathbb{P}[x]_3$ 中任意多项式 $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2$，显然其坐标向量 $\boldsymbol{x}=(a_0,a_1,a_2)^{\mathrm{T}}$ 是唯一的，因此 f_1,f_2,f_3 是 $\mathbb{P}[x]_3$ 的一组基，即 $\dim\mathbb{P}[x]_3=3$.

(2)由(1)知所求 $x=(3,2,4)^{\mathrm{T}}$.

(3)易证 g_1,g_2,g_3 线性无关，这是因为当 $k_1g_1+k_2g_2+k_3g_3=0$ 时，即

$$(k_1-2k_2+4k_3)+(k_2-4k_3)x+k_3x^2=0$$

从而 $k_1=k_2=k_3=0$. 又 $\mathbb{P}[x]_3$ 的维数为 3，因此 g_1,g_2,g_3 也是 $\mathbb{P}[x]_3$ 的一组基.

由高等数学中的泰勒公式，可知

$$f_1=1\cdot1+0\cdot(x-2)+0\cdot(x-2)^2=1\cdot g_1+0\cdot g_2+0\cdot g_3$$
$$f_2=2\cdot1+1\cdot(x-2)+0\cdot(x-2)^2=2\cdot g_1+1\cdot g_2+0\cdot g_3$$
$$f_3=4\cdot1+4\cdot(x-2)+1\cdot(x-2)^2=4\cdot g_1+4\cdot g_2+1\cdot g_3$$
$$f=23\cdot1+18\cdot(x-2)+4\cdot(x-2)^2=23\cdot g_1+18\cdot g_2+4\cdot g_3$$

所以，所求坐标向量分别为 $\boldsymbol{p}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{p}_2=(2,1,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{p}_3=(4,4,1)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y}=(23,18,4)^{\mathrm{T}}$.

将此例推广到 $\mathbb{P}[x]_n$，易知 $\mathbb{P}[x]_n$ **的标准基**为

$$f_1 = 1, f_2 = x, f_3 = x^2, \cdots, f_n = x^{n-1}$$

因而 $\dim \mathbb{P}[x]_n = n$. 而 $\mathbb{P}[x]$ **的标准基**则为

$$f_1 = 1, f_2 = x, f_3 = x^2, \cdots, f_n = x^{n-1}, f_{n+1} = x^n, \cdots$$

这说明 $\dim \mathbb{P}[x] = +\infty$, 即 $\mathbb{P}[x]$ 是无限维线性空间.

如果将 $\mathbb{P}[x]_3$ 的两组基分别从**形式上**记成"向量"(f_1, f_2, f_3) 和 (g_1, g_2, g_3), 那么**形式上**也有

$$g_1 = (f_1, f_2, f_3)\boldsymbol{p}_1, g_2 = (f_1, f_2, f_3)\boldsymbol{p}_2, g_3 = (f_1, f_2, f_3)\boldsymbol{p}_2$$

进一步地,如果将坐标向量排列成坐标矩阵 $\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_3)$, 那么形式上也有基变换公式

$$(g_1, g_2, g_3) = (f_1, f_2, f_3)\begin{pmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (f_1, f_2, f_3)(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_3) = (f_1, f_2, f_3)\boldsymbol{P}$$

定义 2.2.3 设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 和 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 是 n 维线性空间 V 的两组基,且存在矩阵 $\boldsymbol{P}$, 使得

$$(\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P} \tag{2.2.6}$$

则称式(2.2.6)为基变换公式,称矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的过渡矩阵.

当 V 为向量空间 $\mathbb{R}^n$ 时, $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 是线性无关的 n 维列向量组,因此式(2.1.3)成立. 但对于一般的线性空间,式(2.1.3)未必成立,因为此时**形式上的"向量"**$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)$**未必是矩阵**,更遑论是否可逆. 这是线性空间 V 与向量空间 $\mathbb{R}^n$ 之间的一个重大区别. 当然,这种形式上的简便写法,在仅涉及加法和数乘运算时,矩阵运算规律仍然成立.

过渡矩阵 $\boldsymbol{P}$ 是以新基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的各基向量在旧基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标向量为列向量构成的坐标矩阵,它一定是可逆矩阵. 事实上,若矩阵 $\boldsymbol{P}$ 不可逆,则以 $\boldsymbol{P}$ 为系数矩阵的齐次线性方程组 $\boldsymbol{Pk} = \boldsymbol{0}$ 有非零解 $\boldsymbol{k} = (k_1, k_2, \cdots, k_n)^{\mathrm{T}}$, 因此

$$k_1\boldsymbol{\beta}_1 + k_2\boldsymbol{\beta}_2 + \cdots k_n\boldsymbol{\beta}_n = (\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n)k = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{Pk} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{0} = \boldsymbol{\theta}$$

从而 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 线性相关. 这与 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 是一组基矛盾. 所以 $\boldsymbol{P}$ 是可逆的.

定理 2.2.4 设 n 维线性空间 V 中元素 $\boldsymbol{\alpha}$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 与基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 下的坐标向量分别为 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{P}$ 为基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的过渡矩阵,则成立坐标变换公式:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Py} \text{ 或者 } \boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x} \tag{2.2.7}$$

证明: 由于 $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{x}$ 及 $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\beta}_1, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{y}$, 注意到式(2.2.6), 代入可知

$$\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\beta}_1, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{Py}$$

再根据定理 2.2.3 即得 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$. 由于 $\boldsymbol{P}$ 可逆,因此亦有 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$.

例 2.2.15　由例 2.2.14 可知, f 在基 f_1,f_2,f_3 下的坐标向量为 $\boldsymbol{x}=(3,2,4)^{\mathrm{T}}$, 而且基 f_1,f_2,f_3 到基 g_1,g_2,g_3 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1 & -2 & 4\\ 0 & 1 & -4\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$, 所以 f 在基 g_1,g_2,g_3 下的坐标向量为

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 4\\ 0 & 1 & 4\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3\\ 2\\ 4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}23\\ 18\\ 4\end{pmatrix}$$

思考:从计算 $\boldsymbol{y}$ 的计算量看,这里的方法比例 2.2.14 中的方法大,那么其意义又何在呢?

例 2.2.16　已知矩阵空间 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 中的两组矩阵:

$$(\mathrm{I}):\boldsymbol{A}_1=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\boldsymbol{A}_2=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\boldsymbol{A}_3=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{A}_4=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix};$$

$$(\mathrm{II}):\boldsymbol{B}_1=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix},\boldsymbol{B}_2=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{B}_3=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{B}_4=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}.$$

(1)证明 (I):$\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4$ 和 (II):$\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3,\boldsymbol{B}_4$ 都是 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的基;

(2)求基 (I) 到基 (II) 的过渡矩阵 $\boldsymbol{C}$;

(3)分别求任意矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{2\times2}$ 在基 (I) 和基 (II) 下的坐标向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$.

解:(1)易知 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4$ 线性无关,因为若有 $k_1\boldsymbol{A}_1+k_2\boldsymbol{A}_2+k_3\boldsymbol{A}_3+k_4\boldsymbol{A}_4=\boldsymbol{O}$, 则

$$k_1+k_2=0,k_3+k_4=0,k_3-k_4=0,k_1-k_2=0$$

解得 $k_1=k_2=k_3=k_4=0$. 又对任意矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{2\times2}$, 有

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(a+d)\boldsymbol{A}_1+\frac{1}{2}(a-d)\boldsymbol{A}_2+\frac{1}{2}(b+c)\boldsymbol{A}_3+\frac{1}{2}(b-c)\boldsymbol{A}_4 \qquad (2.2.8)$$

因此, (I):$\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4$ 是 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的一组基,且 $\dim\mathbb{R}^{2\times2}=4$.

类似地,可知 $\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3,\boldsymbol{B}_4$ 线性无关,且"向量"个数等于 $\dim\mathbb{R}^{2\times2}$, 因此 (II):$\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3,\boldsymbol{B}_4$ 也是 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的一组基.

(2)联想到第 1 章中用到的基本矩阵,并注意到 $\boldsymbol{A}=a\boldsymbol{E}_{11}+b\boldsymbol{E}_{12}+c\boldsymbol{E}_{21}+d\boldsymbol{E}_{22}$, 这里

$$(\mathrm{III}):\boldsymbol{E}_{11}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{E}_{12}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{E}_{21}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{E}_{22}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

易知 (III)：$\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22}$ 也为 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的一组基(称为 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的标准基).

显然 $\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{E}_{11}+\boldsymbol{E}_{22}=1\cdot\boldsymbol{E}_{11}+0\cdot\boldsymbol{E}_{12}+0\cdot\boldsymbol{E}_{21}+1\cdot\boldsymbol{E}_{22}$，所以 $\boldsymbol{A}_1$ 在标准基 (III) 下的坐标向量为 $(1,0,0,1)^{\mathrm{T}}$. 类似地，$\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3$ 和 $\boldsymbol{A}_4$ 在标准基 (III) 下的坐标向量分别为 $(1,0,0,-1)^{\mathrm{T}}$，$(0,1,1,0)^{\mathrm{T}}$ 和 $(0,1,-1,0)^{\mathrm{T}}$. 因此，基 (III) 到基 (I) 的过渡矩阵为

$$\boldsymbol{C}_1=\begin{pmatrix}1&1&0&0\\0&0&1&1\\0&0&1&-1\\1&-1&0&0\end{pmatrix}$$

同理，可得基 (III) 到基 (I) 的过渡矩阵为

$$\boldsymbol{C}_2=\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&1&1&0\\1&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}$$

由于 $(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4)=(\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22})\boldsymbol{C}_1$，此即 $(\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22})=(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4)\boldsymbol{C}_1^{-1}$，将之代入到 $(\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3,\boldsymbol{B}_4)=(\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22})\boldsymbol{C}_2$ 中，即得

$$(\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3,\boldsymbol{B}_4)=(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4)\boldsymbol{C}_1^{-1}\boldsymbol{C}_2$$

也就是说

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_1^{-1}\boldsymbol{C}_2=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&1\\1&0&0&-1\\0&1&1&0\\0&1&-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&1&1\\1&1&1&0\\1&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2&1&1&1\\0&1&1&1\\2&2&1&0\\0&0&1&0\end{pmatrix}$$

(3)由式 (2.2.8) 可知 $\boldsymbol{x}=\frac{1}{2}(a+d,a-d,b+c,b-c)^{\mathrm{T}}$. 我们换一种方式来求 $\boldsymbol{y}$.

由(2)知 $\boldsymbol{A}$ 在基 (III) 下的坐标向量为 $\boldsymbol{z}=(a,b,c,d)^{\mathrm{T}}$，而基 (III) 到基 (I) 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{C}_2$，因此由式 (2.2.7) 可知 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{C}_2^{-1}\boldsymbol{z}=(d,c-d,b-c,a-b)^{\mathrm{T}}$.

注意：这里我们引入了“标准基”作为中介，因为矩阵在其下的坐标就是相应矩阵元素. 题中 $(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\boldsymbol{A}_3,\boldsymbol{A}_4)$ 等记号仍然是**形式上的**“向量”，没有逆矩阵，所以不满足式 (2.1.3).

由于 $\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22}$ 是 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的标准基，因此 $\dim\mathbb{R}^{2\times2}=4=2\times2$，这个结果显然可推广到 $\mathbb{R}^{m\times n}$，即 $\dim\mathbb{R}^{m\times n}=mn$. 而 $\mathbb{R}^{m\times n}$ **的标准基**，其实就是基本矩阵组

$$\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\cdots,\boldsymbol{E}_{1n},\boldsymbol{E}_{21},\cdots,\boldsymbol{E}_{m-1,n},\boldsymbol{E}_{m1},\boldsymbol{E}_{m2},\cdots,\boldsymbol{E}_{mn} \tag{2.2.9}$$

例 2.2.17 满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$ 的实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为实对称矩阵(symmetric matrix).

(1)证明所有二阶实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的集合 $\mathbb{SR}^{2\times2}$ 构成 $\mathbb{R}$ 上的线性空间；

(2)求 $\mathbb{SR}^{2\times2}$ 的一组基.

解:(1)留给读者作为练习.

(2)对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{SR}^{2\times2}$,由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$,故有

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a & b\\ b & c\end{pmatrix}=a\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}+c\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\equiv a\boldsymbol{E}_1+b\boldsymbol{E}_2+c\boldsymbol{E}_3$$

又易证 $\boldsymbol{E}_1,\boldsymbol{E}_2,\boldsymbol{E}_3$ 线性无关,因此 $\boldsymbol{E}_1,\boldsymbol{E}_2,\boldsymbol{E}_3$ 即为所求.

推广到 n 阶,易证所有 n 阶实对称矩阵的集合 $\mathbb{SR}^{n\times n}$ 仍然构成 $\mathbb{R}$ 上的线性空间. 如果再注意到 $n=2$ 时 $\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_3=\boldsymbol{E}_{22},\boldsymbol{E}_2=\boldsymbol{E}_{12}+\boldsymbol{E}_{21}$,则可得 $\mathbb{SR}^{n\times n}$ 的一组基为

$$\boldsymbol{F}_{11},\boldsymbol{F}_{12},\cdots,\boldsymbol{F}_{1n},\boldsymbol{F}_{22},\boldsymbol{F}_{23},\cdots,\boldsymbol{F}_{2n},\boldsymbol{F}_{33},\cdots,\boldsymbol{F}_{n-1,n},\boldsymbol{F}_{nn} \tag{2.2.10}$$

其中,$\boldsymbol{F}_{ii}=\boldsymbol{E}_{ii},\boldsymbol{F}_{ij}=\boldsymbol{E}_{ij}+\boldsymbol{E}_{ji}$ ($i,j=1,2,\cdots,n$ 且 $j>i$),此即 $\dim\mathbb{SR}^{n\times n}=\dfrac{1}{2}n(n+1)$.

思考:如果 n 阶实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A}$,则称 $\boldsymbol{A}$ 为**反对称矩阵**(anti-symmetric matrix)或**斜对称矩阵**(skew-symmetric matrix). 对所有 n 阶反对称矩阵的集合 $\mathbb{SSR}^{n\times n}$ 而言,上述问题的结果又是什么呢?

2.2.4　线性空间的同构

从例 2.2.7 易知,线性微分方程 $\dfrac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t^2}+\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 的解集是一个线性空间. 从物理上看,此方程的解 $\boldsymbol{x}(t)$ 恰好描述了质点的某种运动方式. 因此一旦给定质点的初始位置 $\boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{p}$ 和初始速度 $\boldsymbol{x}'(0)=\boldsymbol{v}$,就可以确定质点在任意时刻的运动状态方程. 这意味着方程的解 $\boldsymbol{x}(t)$ 也可以用有序向量组 $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{v})$ 来表示.

显然,这两种表示间的关系是线性的,即若有序向量组 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{w})$ 对应 $\boldsymbol{y}(t)$,则 $(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q},\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})$ 是解 $\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{y}(t)$ 的初值条件,且 $(k\boldsymbol{p},k\boldsymbol{v})$ 对应 $k\boldsymbol{x}(t)$.

这种联系并不是偶然的. 比如线性空间 V 中的任意元素 $\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\alpha}_1+x_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{\alpha}_n$,在给定基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 下,与向量空间 F^n 中的向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 是一一对应的,即在 n 维线性空间 V 与 F^n 之间,实质上存在一个映射 $\mathcal{F}:\boldsymbol{\alpha}\mapsto x$,而且 $\mathcal{F}$ 既是单射又是满射,即一一映射或双射.

更一般地,可以引入两个线性空间之间的类似联系,即同态与同构.

定义 2.2.4　(同态映射) 设 V_1,V_2 是数域 $\mathbb{F}$ 上的两个线性空间,$\mathcal{F}:V_1\mapsto V_2$ 是 V_1 到 V_2 的映射(未必一一对应). 如果对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V_1$ 和任意 $k\in\mathbb{F}$,都有

(1)可加性:$\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})=\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})+\mathcal{F}(\boldsymbol{\beta})$.

(2)齐次性:$\mathcal{F}(k\boldsymbol{\alpha})=k\,\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})$.

则称 $\mathcal{F}$ 为 V_1 到 V_2 的(线性)**同态映射**(homomorphism)、**线性映射**(linear mapping)或**线性算子**(linear operator). 特别地,当 V_2 为 $\mathbb{F}$ 时,称 $\mathcal{F}$ 为 V_1 上的**线性泛函**(linear functional);当 V_1 与 V_2 是同一个线性空间 V 时,称 $\mathcal{F}$ 为 V 上的**自同态映射**(endomorphism)或**线性变换**(linear transformation).

可以证明,可加性与齐次性合在一起就是线性性.

(3)线性性:$\mathcal{F}(k\boldsymbol{\alpha}+l\boldsymbol{\beta})=k\,\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})+l\,\mathcal{F}(\boldsymbol{\beta})$,$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V_1$,$k,l\in\mathbb{F}$.

请读者注意,有的书中将线性映射与线性变换统称为线性变换.

例 2.2.18 考虑线性空间 V 中的**平移变换**(translation transformation)

$$\mathcal{M}: \boldsymbol{\alpha} \mapsto \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}_0,$$

其中,$\boldsymbol{\alpha}_0$ 为 V 中的某个特定的非零向量. 显然$\mathcal{M}$是一一对应的,但却不是线性变换,因为

$$\mathcal{M}(2\boldsymbol{\alpha}) = (2\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}_0) \neq 2(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}_0) = 2\mathcal{M}(\boldsymbol{\alpha})$$

定义 2.2.5 **(同构映射)**设 V_1, V_2 是数域 $\mathbb{F}$上的两个线性空间,如果 $\mathcal{F}: V_1 \mapsto V_2$ 是 V_1 到 V_2 的(线性)同态映射,并且是一一对应的,则称$\mathcal{F}$为 V_1 到 V_2 的(线性)**同构映射**(isomorphism),并称 V_1 与 V_2 **同构**(isomorphic),记为 $V_1 \cong V_2$.

显然,同构映射是特殊的同态映射.

借用几何直观,可称 $\boldsymbol{\alpha}' = \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 在$\mathcal{F}$下的**像**(image),称 $\boldsymbol{\alpha}$ 为$\boldsymbol{\alpha}' = \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})$ 在$\mathcal{F}$下的**原像**(inverse image),此时,可加性意味着"**和的像等于像的和**",即 $\mathcal{F}: \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta} \mapsto \boldsymbol{\alpha}' + \boldsymbol{\beta}'$,齐次性则意味着"**数乘的像等于像的数乘**",即 $\mathcal{F}: k\boldsymbol{\alpha} \mapsto k\boldsymbol{\alpha}'$. 这也就是说,同构映射保持了加法与数乘运算,即原像之和对应于像之和,数乘原像对应于用同一个数去乘像. 以此观之,同构映射还具有下列性质:

定理 2.2.5 **(同构映射的性质)**设 $\mathcal{F}$是数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V_1 到 V_2 的同构映射,则

(I1)(零元对应零元) $\mathcal{F}(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\theta}'$,其中 $\boldsymbol{\theta}$ 是 V_1 的零元,$\boldsymbol{\theta}'$ 是 V_2 的零元;

(I2)(负元对应负元) $\mathcal{F}(-\boldsymbol{\alpha}) = -\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha})$;

(I3)(叠加性或线性性) $\mathcal{F}(k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_s\boldsymbol{\alpha}_s) = k_1\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_1) + k_2\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_2) + \cdots + k_n\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_s)$;

(I4)(线性无关组对应线性无关组) V_1 中的向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_s$ 线性无关的充要条件是 V_2 中的向量组 $\mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_1), \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_2), \cdots, \mathcal{F}(\boldsymbol{\alpha}_s)$ 线性无关.

例 2.2.19 在同构映射 $\sigma(a) = \lg a$ 下,$\mathbb{R}^+ \cong \mathbb{R}$,这里的 $\mathbb{R}^+$ 见例 2.2.8.

$\mathbb{R}^+ \cong \mathbb{R}$ 表明,$\mathbb{R}^+$ 中的乘法和乘方分别对应于 $\mathbb{R}$ 中的加法和乘法,这就是对数运算的理论依据. 作为 17 世纪数学的三大成就之一(另外两个是解析几何的创立和微积分的建立),对数运算的伟大之处正在于借助这种同构关系,把 $\mathbb{R}^+$ 中复杂的乘法和乘方运算转化为 $\mathbb{R}$ 中简单的加法和乘法运算. 下面的定理告诉我们,这类转化在数学里仅仅是沧海一粟而已.

定理 2.2.6 **(线性空间的同构定理 1)**数域 $\mathbb{F}$上的 n 维线性空间 $V \cong F^n$.

证明:根据前面的分析,对映射 $\mathcal{F}: V \mapsto F^n$,即

$$\boldsymbol{\alpha} = x_1\boldsymbol{\alpha}_1 + \cdots + x_n\boldsymbol{\alpha}_n \in V \xrightarrow{\mathcal{F}} \boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in F^n$$

易证$\mathcal{F}$是同构映射. 证毕.

显然,$V \cong F^n$ 意味着在千差万别的 V 中,无论"向量"如何"美丑妍媸",无论涉及的运算如何千奇百怪,最终都可归结为对"向量"坐标的计算,也就是数的运算. 如此说来,向量空间 F^n 并不只是一个特殊的 n 维线性空间,它是我们选出的"代表",集万千宠爱于一身.

再来看线性空间的维数. 数域 $\mathbb{F}$上的 n 维线性空间 $V_1 \cong F^n$,m 维线性空间 $V_2 \cong F^m$,显然 $V_1 \cong V_2$ 等价于 $F^n \cong F^m$,也就是 $m = n$.

定理 2.2.7 （线性空间的同构定理 2）数域 $\mathbb{F}$上的任意两个有限维线性空间同构的充要条件是它们有相同的维数.

这说明，**维数是有限维线性空间唯一的本质特征**，在同构意义下，维数相同的线性空间可以不加区分，它们最终都归结为一个数，这真是"万物皆数". "道生一，一生二，二生三，三生万物". 面对"数"这个"万物之本"，我们不禁要陷入深思：维数究竟为何物？

2.2.5 向量空间的历史：狂飙的数学

对电影《悲惨世界》（2012 版）中的沙威，大家肯定印象深刻. 他的原型在自己的文集中写道："在 6 月 2 日，有两三千共和党人参加了莱伽罗瓦的葬礼游行，他们（原本）打算返回时开始设置路障……"这里的莱伽罗瓦是伽罗瓦（Galois，见图 2－5）的误拼. 伽罗瓦的命运是如此悲惨，以至于连引燃起义的机会都没得到. 当然，他的悲剧既与他古怪和病态的性格有关，也与 1830 年前后法国动荡的社会密切相关. 在他短暂但充满青春和激情的 21 年人生中，他经历两次考试失败、两次手稿被人遗失、两次入狱、父亲惨死等人生打击.



图 2－5　伽罗瓦自画像 (1811—1832)

如果没有 1832 年 5 月 30 日清晨巴黎郊外森林中的那场决斗，如果天才伽罗瓦没有因子弹击中腹部，如果柯西和傅立叶（Joseph Fourier）等审稿人没有两度遗失他提交给法国科学院的手稿，如果泊松读懂了他的第三份手稿……那么伽罗瓦伟大的洞察力或许能提前半个世纪为人所知，群论乃至抽象代数或许也会更早地来到人间. 历史不能假设. 但是，在决斗前夜反复提到"我没有时间"的状况下，伽罗瓦非常清楚自己匆匆写下的这些混乱的东西"将会非常有用"，因此他"**请求雅可比（Carl Jacobi）或高斯评判这些定理是否重要，而不是是否正确**".

伽罗瓦在"开创性和概念的深邃方面无人能及". 他最主要的成就是提出"群"的概念，彻底解决了代数方程根式求解问题，并由此发展出一整套关于群和域的理论，即伽罗瓦理论. 由此，古代数学三大难题中的三等分任意角和倍立方体等都是不可能的.

伽罗瓦的思想主要体现在他 1831 年提交的手稿《关于用根式解方程的可解性条件》之中，其中扼要地证明了以下结果：

假定 $\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \cdots$是方程的根（他默认该方程不可约，且所有根互不相同），则 $\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \cdots$的一个置换群（他称为方程的群）满足下列性质：

（1）每个在群的替换下不变的根的函数是有理的；

（2）反之，这些根的每一个有理函数在这些置换下都是不变的.

然后伽罗瓦开始探求该结果在方程可解性问题上的应用.

令 R 是由添加字母或未知数 p、q 到有理数中而得到的域，即由 p、q 的有理表达式所形成的域. 那么方程 $x^4+px^2+q=0$ 的四个根是：

$$x_1=\sqrt{\frac{-p+\sqrt{\Delta}}{2}},\ x_2=-\sqrt{\frac{-p+\sqrt{\Delta}}{2}},\ x_3=\sqrt{\frac{-p-\sqrt{\Delta}}{2}},\ x_4=-\sqrt{\frac{-p-\sqrt{\Delta}}{2}}$$

其中，$\Delta = p^2 - 4q$.

显然，在 R 中成立关系 $x_1 + x_2 = 0$，$x_3 + x_4 = 0$. 考虑四个根的种置换 $4! = 24$，其中使得前面的两个关系保持成立即不变的是下列八个置换：

$$E_1 = (1234),\ E_2 = (2134),\ E_3 = (1243),\ E_4 = (2143)$$
$$E_5 = (3412),\ E_6 = (4312),\ E_7 = (3421),\ E_8 = (4321)$$

可以证明，在所有置换中，这八个置换是使得根在中的全部关系都保存不变的置换，因此它们便是这方程在 R 中的群 G.

现在考虑新关系 $x_1^2 - x_3^2$，即$\sqrt{\Delta}$，将它添加到 R 中，形成新的域 R'，即包含 R 和$\sqrt{\Delta}$的最小的域. 此时只有前四个置换 E_1，…，E_4 使得 R'中的这个新关系保持不变，因此它们就是方程在 R'中的群 H. 事实上，这里的 H 是 G 的子群，它的阶为 4，指数为$\frac{8}{4} = 2$，是 G 的最大子群. 由 G 确定 H 后，可找到一个根的函数 φ(前例中 $\varphi = x_1^2 - x_3^2$). 这可以通过一个阐述为群 H 的指数的部分预解式求得(前例中是 $t^2 - (p^2 - 4q) = 0$)，将 $\varphi = \sqrt{\Delta}$添加到 R 中，形成新的域 R'，因此方程关于域 R'的群就是 H.

重复上述过程，直至方程关于某域 $\hat{R}$ 的群恰是恒等置换 E_1 时，方程的根就都属于在该域 $\hat{R}$ 中. 而这个域是由已知域通过逐次添加已知量得到的.

接着伽罗瓦引入正规子群的概念，并在其手稿和决斗前夜给朋友的信中推断：方程是根式可解的，当且仅当所找到的正规子群序列(即合成序列)中所有子群的指数都是素数，即方程的群是可解群.

在其短暂的一生中，伽罗瓦的成果总共不到 60 页，后来刘维尔(Joseph Liouville，1809—1882)整理了伽罗瓦的大部分遗稿，并于 1846 年刊登在《纯粹与应用数学杂志》上. 该刊是刘维尔于 1836 年创立的，旨在刊登纯粹与应用数学领域所有分支的论文，是有关 19 世纪中期的 40 年里数学活动的重要文献. 对伽罗瓦事件，刘维尔评述道："一个才智过人的考生由于弱智的主考官而落榜，因为他们不理解我，我是一个野蛮人."

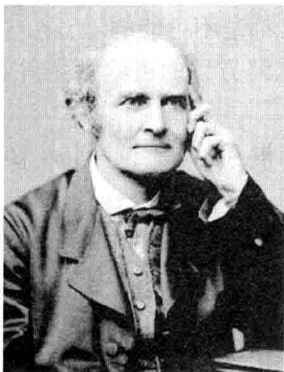


图 2-6　凯莱(1821—1895)

20 年后，矩阵论的创始人凯莱(Arthur Cayley，见图 2-6)在《群论》(1854 年)中首次给出了有限群的抽象定义，即群是"不同符号 1，α，β，…的集合，其中任何两个元的乘积(不计顺序)，或者任何元与自身的乘积，都属于这个集合."接下来他给出了几个例子(四元数、可逆矩阵、排列等). 他还展示了 4 个元素的两个可能群的群表及 6 个元素的两个群表. 他的文章也没有引起共鸣，因为"过早的抽象落到了聋子的耳朵里，无论它们是属于数学家们的还是属于大学生们的."(M. 克莱因)后来，在 1878 年，凯莱重述了他的定义和结论，并指出"群是由符号以及所满足的运算律来定义的".

有限群完整的公理化描述最早是由韦伯(Heinrich Martin Weber，1842—1913)在 1882 年一篇论述二次型的文章中给出的，具体如下：

由 h 个任意元素 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_h$ 组成的系统 G 被称为阶数为 h 的群，如果它满足下列

条件：

(1)通过某个被称之为复合或相乘的法则，可以从系统 G 中的任意两个元素导出 G 中的一个新元素. 用符号表示，就是 $\theta_r\theta_s=\theta_t$.

(2)总有 $(\theta_r\theta_s)\theta_t=\theta_r(\theta_s\theta_t)=\theta_r\theta_s\theta_t$ 成立.

(3)从 $\theta\theta_r=\theta\theta_s$，或从 $\theta_r\theta=\theta_s\theta$，可得 $\theta_r=\theta_s$.

显然，韦伯的定义没有涉及元素的特性. 虽然 F. 克莱因(Felix Klein，1849－1925)持保留意见，但它却在 1890 年得到公认，因为在当时，人们已发现了好几种重要的群：排列群、阿贝尔群、离散变换群(有限的与无限的)，并且发现群在数学的各种领域中开始扮演中心的角色.

在哈密尔顿、伽罗瓦和凯莱带来代数学的解放的同时，几何学中则掀起了一场更猛烈的风暴，不仅导致了相对论的诞生，而且深刻地改变了人们对宇宙的认识，这就是高斯等人发现的非欧几何. 非欧几何证明了“人类悟性的自由创造”有时会具有一万颗原子弹所无法比拟的强大威力.

众所周知，欧几里得(Euclid，约公元前 330—前 275 年)在《几何原本》中给出了五个公设，其中第五公设为：若一直线与两直线相交，且若同侧所交两内角之和小于两直角，则两直线延长后必相交于该侧的一点. 早在公元前，人们就发现欧几里得的第五公设不仅叙述繁琐，而且不像其他四个公设那样是自明的. 事实上，与之等价的“平行线公设”更直观易懂：设有一直线及直线外一点，则过该点可以做唯一的一条直线与该直线平行. 按齐民友先生的解释，欧几里得之所以采用这么拖沓的表述语言，是因为他想极力避免希腊数学家觉得可怕和难以理解的“无限”概念.

有些数学家还注意到《几何原本》中只在命题二十九中使用过第五公设，因此人们一直怀疑第五公设的独立性，并尝试用其他公设来证明它. 这种努力延续了几千年仍然没有结果，许多数学家为此抱憾终身. 直到 19 世纪初，人们开始逐步意识到“第五公设是不可证明的”，因此“要么承认平行线假设，要么换一个新的公设得到一种新的几何”. 这种“新的几何”就是非欧几何. 同时独立地创立非欧几何的，有小鲍耶(János Bolyai，1802－1860，见图 2－7)、罗巴切夫斯基(Nikolai Lobachevsky，1792－1856，见图 2－8)和高斯.



图 2－7　小鲍耶(1802—1860)



图 2－8　罗巴切夫斯基(1792—1856)

据说小鲍耶是一位数学神童. 他 13 岁时已经懂得微积分,曾代父上课,并获学生好评. 老鲍耶毕生致力于第五公设的证明,但正如在给儿子信中所言:"它熄灭了我一生的所有光明和乐趣."因此当他得知儿子也在研究第五公设时,当然极力劝阻:"求求你,看在上帝的份上,放弃它吧. 它像肉体的激情一样让人恐惧,因为它也会占用你全部的时间,剥夺你身体的健康、内心的平静和生活的快乐."可是小鲍耶对此已经铁了心,尽管还没有获得令自己满意的结果,但在回信中,他仍然豪迈地宣布道:**"我已从一无所有之中创造了一个新宇宙."**这个新宇宙就是:过直线外一点可以做无数条直线与已知直线平行. 既然如此,老鲍耶也就不再为难儿子,反而督促小鲍耶立刻发表这个成果,因为"许多东西似乎都有一个时机,时机一到就会在几个不同的地方被发现,好像春天的紫罗兰处处开放一样". 经过多年研究,1832 年,小鲍耶以"空间的绝对科学"为题,将自己的研究成果以附录的形式发表在父亲的一本书中. 老鲍耶连忙把此书寄给自己在哥廷根大学学习期间结交的密友高斯,希望得到支持. 回信很快就来了,在信中,高斯写道:"您的儿子采用的途径和得到的结果,几乎和我自己的沉思完全一样. 这思想萦绕于我心已有 30 到 35 年了(高斯时年 55 岁)."小鲍耶深受打击,自此后拒绝发表自己的研究成果.

"春天的紫罗兰"也绽放在当时的俄罗斯. 几乎与小鲍耶同时,喀山大学的罗巴切夫斯基于 1826 年在学校宣读了一篇论文,阐述了他的几何思想. 3 年后,他在《喀山学报》上发表"论几何学原理"一文,正式宣布第五公设是不可证明的,并提出了一个新的公设:过直线外一点可以有一条以上的直线不与已知直线相交. 采用这个新公设,罗巴切夫斯基推导出了一种新几何. 尽管新几何中没有任何内在的逻辑矛盾,但它看上去与常识完全背道而驰,甚至连罗巴切夫斯基自己也称之为"虚几何学". 1832 年,根据罗巴切夫斯基的请求,该文被呈送给彼得堡科学院审评. 负责评定的是新当选的院士奥斯特罗格拉茨基(Mikhail Ostrogradski,1801—1862). 尽管在数学物理、数学分析、力学和天体力学等方面有着卓越的成就,但这位新院士不仅没能理解罗巴切夫斯基的新几何学思想,还使用极其挖苦的语言,对罗巴切夫斯基作了公开的指责和攻击. 在提交给科学院的鉴定书一开头,他就以嘲弄的口吻写道:"看来,作者旨在写出一部使人不能理解的著作. 他达到了自己的目的."最后他粗暴地断言:"这部著作谬误连篇,因而不值得科学院的注意."

尽管没有获得理解和支持,罗巴切夫斯基完全清楚这种新几何所具有的重要意义,因而坚持"一个人的战争". 他先后撰写了三部专著,详尽地介绍和推广这种新几何,其中 1840 年以德文出版的《平行线理论的几何研究》一书,受到了高斯的注意. 在高斯的推荐下,罗巴切夫斯基被选为哥廷根科学院院士. 然而在公开的出版物中,高斯从未对罗巴切夫斯基的工作给予支持. 这也使得人们对新几何学的了解十分缓慢. 罗巴切夫斯基,这位非欧几何的拓荒者,不得不在与世隔绝的孤独中踽踽前行,直至 1856 年逝世. 到了 1868 年,贝尔特拉米(Eugenio Beltrami,1835—1900)考察了伪球面,即曳物线绕其渐近线旋转而形成的回转曲面,给出了罗巴切夫斯基和小鲍耶的非欧几何的一个具体实现. 直到这时,长期无人问津的非欧几何才开始获得学术界的普遍注意和深入研究,罗巴切夫斯基的独创性研究也由此得到学术界的高度评价和一致赞美,他本人也被人们赞誉为"几何学中的哥白尼".

伟大的高斯为何不敢公开支持非欧几何呢? 这是因为当时占据统治地位的是德国古



图2-9　康德(1724—1804)

典哲学的奠基人康德(Immanuel Kant,见图2-9)的时空观.

在康德之前的时代,哲学家们围绕着科学知识的"确证性问题",即作为真理的科学知识具有何种特征,展开了激烈的争论,这在哲学史上被称之为"认识论转向".当时占据主流地位的哲学思想为英国经验主义和大陆理性主义.英国经验主义的代表人物为培根(Francis Bacon,1561— 1626)、洛克(John Locke,1632—1704)、贝克莱(George Berkeley,1685—1753)和休谟(David Hume,1711—1776).他们认为知识只能来源于感觉经验,所谓的科学(在当时的语境下特指实验科学),就是对感觉经验的归纳,因此他们思考的焦点主要集中在从经验中得到的感觉材料是如何构成知识的.他们的模式可以表述为"经验—观念—知识",即以经验来说明观念、以观念的组合或分解来说明知识的.经验主义的局限就在于它既无法说明知识的客观可靠性,也无法说明知识的普遍必然性,这使得后来的经验主义者在发展该理论时必然得出怀疑主义和不可知论的结论.

大陆理性主义的代表人物则是笛卡尔、斯宾诺莎(Baruch Spinoza, 1632 —1677)、莱布尼茨(Gottfried von Leibniz,1646—1716),等等.他们认为感觉经验是相对的、个别的、偶然的,因而是不可靠的,具有普遍必然性的科学知识不可能建立在感觉经验的基础之上.如果科学知识是存在的,它必然只能是从理性所固有的天赋观念中推演而来,唯其如此,科学知识才能具有普遍必然性.笛卡尔首先要求以观念的"直观"作为真理性认识的标准,并且以数学、特别是欧氏几何作为一切可靠知识的标本,认为只有像几何学那样从极少几条完全清楚明白的"自明"公理出发,依靠人的"自然灵明",即天赋的理性认识能力,来进行每一步骤都清楚明白、准确无误的推理,这样得来的知识才是可靠的.应当注意的是,笛卡尔的"直观"不是感性的直观,即用眼睛"看",而是理性的直观,即用心灵"看",因此其对象不是客观的现实世界,而是主观的概念世界,这样的直观知识既是主观的,又是先天的.

大陆理性主义认为一切外在对象都必须服从因果决定论,这实际上是把物理学的机械思维应用于整个自然和社会的表现.这样一来,理性主义者和经验主义者一样,都将知识封锁在思的领域内了.试想:如果知识纯粹是靠逻辑由理性演绎出来而与经验无关,那它怎么可能和外部对象一致呢?

正是看到了经验主义与理性主义各自的片面性,康德力图将两者调和起来,从而给近代哲学带来了一场"哥白尼革命".在《纯粹理性批判》一书中,康德试图通过"先验哲学"或者说通过回答"先天综合判断何以可能"来解决知识的确证性问题.他提出了"先天综合判断"的概念,认为知识的确证性在于先天综合判断,或者说先天综合判断使知识成为可能.先天综合判断一方面是一种"先天"的"直观形式",具有理性主义者"天赋"的色彩;另一方面又是后天感觉经验的一种"综合判断".康德的"综合判断"是与"分析判断"相对的概念,前者是"扩展性的",对已有的知识有所增加;后者则是"解释性的",丝毫没有增加知识的内容.为了解释经验的合理性,他又将"综合判断"划分为先天综合判断和后天综合判断,后者"来自经验",前者则"来自纯粹理智和纯粹理性".康德认为,数学判断不仅是综合判断,更是先天的综合判断.问题是:为什么数学判断是先天的呢?康德将

之归结为：纯数学何以可能？然后他通过提出“先验感性论”，回答了这个问题.

康德认为，人类的认识经历三个阶段：感性—知性—理性. 他将感性定义为“通过被对象作用的方式而接受表象的能力”，即感性是人接受对象表象的能力. 他把刺激感官的对象称为物自体，把感官接受的表象称为感性直观，而把感性对物自体的刺激做出的反应称为直观形式. 他进一步将感性直观分为质料和形式两部分：前者是被给予的感性材料，是后天的、经验的感性直观；后者则是先于感觉而存在的，是一种先天的、纯粹的感性直观，他称之为感性纯直观. 感性纯直观是接受并整理杂多现象的先天框架或模式，“这样的(感性纯)直观就是空间和时间”. 他通过论证，进一步指出：空间是几何研究的对象，空间的纯直观性质使得几何学的先天综合判断成为可能. 同理，时间是代数研究的对象，时间的纯直观性质使得代数学的先天综合判断成为可能. 康德的论点其实来自欧氏几何，他想说明欧氏几何的普遍真理性，就将之视为人生而具有的先天框架或模式，因此不使用欧氏几何就不能感知世界.

早在 1824 年给朋友的信中，高斯就指出：“假使三角形的内角和小于 180°会得到一种奇异的几何，和我们的(欧几里得)几何大不相同，然而又是彻底相容的. 我已经把它发展到自己完全满意的程度，我可以解决其中一切问题，但有一个常数无法确定，而它是不能先验地决定的. ”可是，按照康德的理论，根本不可能有非欧几何. 正是顾忌到“比奥西亚人[①]的喧嚣”，从而担心“被卷进任何玄学争论”，高斯迟迟没有发表自己的成果，也没有公开支持小鲍耶和罗巴切夫斯基的工作. 当然，对完美的追求也是其缘由之一，因为高斯坚信“宁可发表少，但发表的东西(必须)是成熟的. ” 这使得他与许多人在优先权上存在争议，比如与勒让德(Adrien-Marie Legendre，1752—1833)在最小二乘法的优先权上就存在争议.

有意思的是，尽管高斯带来了这么伟大的发现，德国马克的设计者却选择了正态分布作为高斯的代表性成果(见图 2－10)，因为高斯在 1809 年出版的论著《天体运动理论》末尾，以极其简单的手法导出了误差分布——正态分布，并用最小二乘法加以验证. 因此，正态分布又被称为高斯分布. 当然关于正态分布是否是高斯最先发现的，也有争议.



图 2－10　德国货币中的高斯与正态分布



图 2－11　黎曼(1826—1866)

到了 1854 年，高斯或许意识到大限将至(次年他就在睡梦中溘然长逝)，一向谨慎的他终于带着少有的热情，在同事面前对另一位天才的工作大加赞赏. 完全当得起他的赞赏的，就是他的学生黎曼(Bernhard Riemann，见图 2－11). 在哥廷根大学的就职仪式上，

① 古希腊雅典以东地区的人，被视为愚蠢、矫饰而无真知. 这里指康德学派的门徒.

按照惯例,黎曼宣讲了一篇名为"关于几何基础的假设"的授课资格论文. 这应该是数学史上最著名的一次试讲,因为黎曼在该文中,用最通俗的语言对整个几何学做了一次深刻而闳阔的概览,俯瞰了当时已陷入杂乱无章中的几何学,从而给出了几何学的一种全新定义,即**几何学是关于流形的一门科学.**

流形指的是带有坐标系及定义了两点之间最短距离的度量公式的空间,或者说是局部具有欧氏空间性质的空间. 以三维欧几里得几何为例,作为特殊的三维流形,其度量公式在无穷小意义下可表示为

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$$

对黎曼而言,几何本质上就是由一个 n 维有序数组$(x_1, x_2, \cdots, x_n)$的集合与定义在该集合上的特定的规则组成的,这个规则就是他的假设:曲线上无穷小距离元素 ds 可表示为 dx_i 的齐次正定二次函数的平方,即

$$ds^2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} g_{ij} dx_i dx_j$$

其中,g_{ij} 为流形上的连续函数,并且 $g_{ij} = g_{ji}$.

由于黎曼的论文中充斥着一大堆陌生概念,竟然使得当时被誉为世界数学中心的哥廷根大学的全体教员个个眼花缭乱,因此尽管有高斯的称赞,但该文中的新思想几乎没在其他场合发生作用,直到黎曼因长期的清贫、过度的操劳和发奋的研究而英年早逝后的第 3 年(即 1868 年),该文才被整理出版并引起更多学者的注意. 尤其值得一提的是赫姆霍尔兹(Hermann von Helmholtz,1821—1894)和克利福德(William Clifford,1845—1879)等人的解释和扩充,使得黎曼的流形理论成为重要的物理研究工具,并在之后的相对论变革中牢牢占据着中心地位.



图 2-12　F. 克莱因(1849—1925)

4 年后的 1872 年,F. 克莱因(Felix Kline,见图 2-12)就任埃尔朗根大学教授,在就职演讲中,他发表了"关于近代几何研究的比较考察"(史称"埃尔朗根纲领")的论文. 在文中,他提出**几何学就是研究在流形中,那些在某个特定的变换群作用下保存不变的图形特性,**按他自己的话说,就是"给定一个流形及其上的一个变换群,研究流形的构形中那些在该变换群下不会改变的特性". 例如,欧氏平面几何所研究的,就是在由平面上的平移和旋转组成的变换群作用下,依然保持不变的图形属性(面积和长度等). 按照这一观点,对变换群的任何一种分类都成了几何学的一种规范化. 换言之,有多少种不同的变换群,就有多少种不同的几何学. 同样令人遗憾的是,该文直到大约 20 年后被译成意大利文、法文和英文后,才受到关注. 从那以后,克莱因的变换群不变量思想成为各类几何的重要研究对象,并为群的抽象概念的发展提供了原动力. 克莱因本人也在晚年扮演着数学领域"元老"的角色,他从 1886 年起开始就职的哥廷根大学也成了学子们心中的"圣地".

到了 19 世纪末,出现了为各种类型的数学结构构造的公理体系,例如群和域,以



图 2-13　希尔伯特(1862—1943)

及正整数集. 1899 年希尔伯特(David Hilbert,见图 2-13)发表的《几何基础》一书,不仅给出了欧氏几何的一个形式公理系统,而且解决了公理化方法的一系列逻辑理论问题,成为形式公理学的奠基著作. 自从该书问世以后,不仅公理化方法进入了数学的其他各个分支,而且也把公理化方法本身推向了形式化的阶段.

在《几何基础》中,希尔伯特从 3 个未定义的对象(点、直线和平面)和 6 种未定义的关系(在上面、在里面、在之间、全等、平行和连续)入手,并借助于 5 组共 20 个公理(被称为希尔伯特公理)来定义它们之间的相互关系. 希尔伯特特别指出,在证明结论中不应该使用几何直觉,因此他甚至幽默地建议用椅子、桌子和啤酒杯来替代点、直线和平面,只要它们满足公理.

在论述完这些公理之后,希尔伯特进而指出它们都是相容的,即从其中不会推导出任何矛盾. 这后来被总结为一个公理系统要具有相容性,即在一个公理系统中,不允许同时能证明某一定理及其否定理. 这实际上是一个基本要求,任何学科和理论体系都必须满足. 一个公理系统还必须具备另一个重要特征,即独立性,它要求在一个公理系统中的每一条公理都独立存在,不允许有一条公理能用其他公理把它推导出来,同时,公理的数目必须减少到最低限度. 虽然希尔伯特没有完整地证明独立性,但他确实指出了不同组的公理之间的独立性. 不过希尔伯特没有论述到公理系统最深层次的特性,即完备性,尽管他相信自己的系统是完备的. 好在《几何基础》出版没多久,就有好几位数学家指出,希尔伯特公理可以证明欧氏几何的所有定理.



图 2-14　皮亚诺(1858—1932)

这种公理化浪潮自然也会波及到线性代数中. 实际上,随着 1862 年格拉斯曼的《线性扩张论》(修订版)的面世,在 1870—1890 年间,与格拉斯曼系统有关的文章开始增多,因此我们可以说线性代数的公理化之路甚至比希尔伯特的《几何基础》还要早 10 年光景. 给出线性代数最早的公理化表述的数学家中,最著名的是皮亚诺(Giuseppe Peano,见图 2-14). 在 1888 年出版的《几何演算》一书中,他陈述了格拉斯曼理论的基本内容. 尽管皮亚诺的表述已经比格拉斯曼的要清晰得多,但由于他仅仅局限于几何学方面,这使得他的著作隐藏了格拉斯曼原著中的一般性. 但令人惊讶的是,在该书的最后一章,皮亚诺给出了被他称为"线性系统"的一个公理化定义,也就是如今的向量空间的第一个公理化定义:

72. 存在这样的实体系统,对它我们给出以下的定义:

1. 系统中两个实体 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 相等是这样定义的:这意味着定义了一个可以写为 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}$ 的命题,它表示系统中两个实体之间存在的一种条件,这种条件只被一些实体对满足的,而其他的实体对并不满足,而且满足以下逻辑方程:

$$(\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}),(\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b})\cap(\boldsymbol{b}=\boldsymbol{c})<(\boldsymbol{a}=\boldsymbol{c})$$[①]

2. 两个实体的和 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$ 是这样定义的:这表示,存在一个被写成 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$ 的实体,它也属于这个系统,而且满足下列条件:

$$(\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b})<(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{c}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}),\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}+(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})+\boldsymbol{c}$$

其中,最后一个等式两端的共同值可以写成 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}$.

3. 令 $\boldsymbol{a}$ 是系统中的一个实体,m 是一个正整数. 我们用表达式 $m\boldsymbol{a}$ 来表示 m 个等于 $\boldsymbol{a}$ 的实体的和. 显而易见,给定系统中的实体 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\cdots$以及正整数 $m,n,\cdots$,有:

$$(\boldsymbol{a}=\boldsymbol{b})<(m\boldsymbol{b}=m\boldsymbol{b});m(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})=m\boldsymbol{a}+m\boldsymbol{b};(m+n)\boldsymbol{a}=m\boldsymbol{a}+n\boldsymbol{a};m(n\boldsymbol{a})=(mn)\boldsymbol{a};l\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}$$

我们假定对于任何的实数 m,表达式 $m\boldsymbol{a}$ 的意义被给定,这样之前的方程仍然成立. 实体 $m\boldsymbol{a}$ 可以被称作(实)数 m 和实体 $\boldsymbol{a}$ 的积.

4. 最后我们假定系统中存在这样一个实体;我们称之为零实体,并用 $\boldsymbol{0}$ 来表示. 那么,对于任意实体 $\boldsymbol{a}$,数 0 和 $\boldsymbol{a}$ 的积将永远是 $\boldsymbol{0}$,或者 $0\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}$.

如若我们指定表达式 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 的含义为 $\boldsymbol{a}+(-1)\boldsymbol{b}$,则成立:

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0};\boldsymbol{a}+0=\boldsymbol{a}$$

定义　如果一个实体系统中满足限定条件的定义 1,2,3,4 都已给出,则称这样的系统为线性系统.

皮亚诺专著的组织结构有些令人惊讶;无论是第一章(通过引入大量新术语,讲述了演绎逻辑的基础)还是最后一章,看起来与专著的其他部分毫无关联. 事实上,皮亚诺的公理化定义是他阅读格拉斯曼的结果,也是他自己的思考以及关于逻辑和形式化的工作的结果. 在这个意义上,相比解决新问题的可能性,很明显,皮亚诺更关心数学基础这个理论问题. 遗憾的是,尽管皮亚诺在某种程度上成功地在意大利推广了格拉斯曼的某些结果,但是他的公理化方法没有被立即接受. 我们就这样与向量空间的公理化表述擦肩而过,直到 40 年之后.

10 年后的 1898 年,皮亚诺给出了向量空间的第 2 个公理化系统. 他陈述了 11 个公理,其中关于向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的内积(他记之为 $\boldsymbol{u}|\boldsymbol{v}$)的 4 个公理($\boldsymbol{u}|\boldsymbol{v}$ 是一个实数;$\boldsymbol{u}|\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}|\boldsymbol{u}$;$(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})|\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}|\boldsymbol{w}+\boldsymbol{v}|\boldsymbol{w}$;如果 $\boldsymbol{u}\neq\boldsymbol{0}$,则 $\boldsymbol{u}|\boldsymbol{u}$ 是一个正实数),后来成为标准公理. 历史再次让我们无语,因为当时除了罗素(Bertrand Russel,1872—1970)以外,这个系统对其他数学家几乎没有产生任何影响. 究其原因,或许是当时的公理化方法尚处幼年,而且当时的公理化与几何的联系是如此紧密,以至于人们丝毫不理会线性代数等其他重要领域的思想.

另一个在线性代数中采用公理化方法的先驱是外尔(Hermann Weyl,1885—1955). 1918 年,他在《空间,时间,物质》一书中,对实数域上的有限维向量空间进行了公理化. 在书中,除了在脚注中提到格拉斯曼 1844 年版的《线性扩张论》之外,他看来对皮亚诺的工作一无所知. 当然,很多人对他的著作也一无所知,因此比起皮亚诺来,他的影响甚至更

---

① 皮亚诺用符号“$=$”来表示相等的关系,用“$<$”表示一种包含关系,“$\cap$”表示连接词“且”.

小.另外,他在该书第一章中给出的定义,是以"仿射几何的基础"为标题的,这显然已经偏离了皮亚诺给出的现代定义.

最终让大家普遍接受向量空间的抽象观念的,是巴拿赫(Stefan Banach,1892—1945)、哈恩(Hans Hahn,1879—1934)和维纳(Norbert Wiener,1894—1964)等泛函分析学家,他们分别独立地给出了完备赋范向量空间的公理化定义,其中巴拿赫的影响力最大,因此完备赋范向量空间又被称为巴拿赫空间.

巴拿赫因第一次世界大战中断了学业,但战后他仍不断钻研数学,靠自学和同数学家交谈获得许多数学知识.1920年,未经大学正规训练的巴拿赫被破格聘用为助教.同年他完成博士论文"关于抽象集合上的运算及其在积分方程上的应用",并在两年后在法国出版了该文的部分内容.在简介中,他写道:"这本书所要达到的目标是建立一些定理,它们对于各种泛函领域都是有效的……在一般情况下,我考虑的是这样的元素集,我假定它们具有某些性质,并由此推导出一些定理,然后我证明所选用的假定对于每一个特定的泛函领域是成立的."这段话表明,巴拿赫明显地是在寻求一种公理化方法,这对当时的分析领域还是很新颖的,虽然在当时的波兰数学家中(巴拿赫是波兰人)这种态度非常流行.

在他的完备赋范向量空间的公理化定义中,巴拿赫将所有公理划分为三部分,虽然他没有对相应的代数结构加以命名. 在列出公理集第一部分的13个公理之后,巴拿赫给出了几个例子:(几何)向量集,格拉斯曼型,复数集和四元数集. 因此尽管他没有提及向量空间之前的任何公理化定义,但是他选择的公理却与向量空间的现代定义非常接近,因为他列出的实际上就是向量空间的8条运算律和5条性质. 再次让我们遗憾的是,他的论文当时影响有限.

倏忽又是十年,到了1932年,巴拿赫的名著《线性算子论》刊行于世.这本书总结了到那时为止关于赋范线性空间的所有成果,包括线性泛函延拓定理、共鸣定理、闭图像定理,让全世界的分析学家看到了泛函分析的威力,成为泛函分析方面的一部经典之作.

与此同时,在代数学领域,在1921年发表的"环中的理想论"一文中,"抽象代数之母"诺特(Emmy Noether,1882—1935)引入了模的概念,并**将向量空间视为模的特殊情形**.1930—1931年间,她的学生范德瓦尔登(Van der Waerden,1903—1996)根据她和阿廷(Emil Artin,1898—1962)的演讲,编写了《范氏大代数》一书,成为抽象代数的代表作,被誉为20上半叶最重要的代数教科书.在该书中,范德瓦尔登特辟专章,对线性代数给予了详细阐述.同诺特一样,他从环上的模的定义开始入手,直到下一页,才给出了向量空间的定义.至此,向量空间的公理化定义才在代数学中呱呱坠地.

在希尔伯特公理化思想和《范氏大代数》的影响下,因不满于当时的数学教育,法国的年轻学子组成了布尔巴基学派. 该学派仿照希尔伯特、诺特以及阿廷的方法,将数学世界主要划分为三种类型:代数结构(群、环、域),序结构(偏序、全序),拓扑结构(邻域、连续、极限、连通性、维数). 这三种结构都是用公理来确定的,它们是母结构或基础结构,其中每一种结构都有许多分支,而且互相有一定的关系. 结构还可以复合成更复杂的结构,比如线性代数中的向量空间. 按这种观点,布尔巴基学派重新建构了几乎整个现代数学,并深刻地影响了后现代数学.如果说抽象代数是"Big Bang"(宇宙诞生的大爆炸理论),那么布尔巴基学派的"结构数学"就是连锁产生的更大的"Big Bang".

"结构数学"给数学教育带来了著名的"新数学运动". 由于过分强调形式主义的演绎,忽视乃至鄙视数学直观及数学思想,"新数学运动"甚至喊出了"欧几里得滚蛋"等极端口号. 结构数学进入中小学课堂后,也使得数学成为学生的梦魇. 在西方,随着"新数学运动"的失败及信息社会的冲击,自 1970 年起,年轻的数学家开始走出布尔巴基学派的光环,投身于更广阔的数学应用,产生了分形、混沌、小波、生命游戏(元胞自动机)、孤立子、密码等新的学科.

2.3　子空间的交与和

整体有时太庞大,所以我们经常希望能够"化整为零,通过部分来获知整体",例如软件设计采用的结构化方法. 对线性空间的研究亦是如此,我们希望将一个高维线性空间分解为多个低维线性子空间的和甚至直和,并通过对线性子空间的研究,更加深刻地揭示整个线性空间的结构.

2.3.1　子空间的交与和

我们知道 $\mathbb{P}[x]_n$ 是线性空间,因此 $n=2,3$ 时的 $\mathbb{P}[x]_2$、$\mathbb{P}[x]_3$ 都是线性空间,但显然 $\mathbb{P}[x]_2 \subset \mathbb{P}[x]_3$,这说明线性空间的子集也可能是线性空间.

定义 2.3.1　设 U 是线性空间 V 的非空子集. 如果 U 在 V 中规定的加法和数乘运算下构成线性空间,则称 U 是 V 的(线性)子空间,仍记为 $U \subseteq V$.

例 2.3.1　显然 $\mathbb{R}=\mathbb{P}[x]_1$ 是 $\mathbb{P}[x]_2$ 的子空间,$\mathbb{P}[x]_2$ 又是 $\mathbb{P}[x]_3$ 的子空间……即有

$$\mathbb{R}=\mathbb{P}[x]_1 \subset \mathbb{P}[x]_2 \subset \cdots \subset \mathbb{P}[x]_n \subset \mathbb{P}[x]_{n+1} \subset \cdots \subset \mathbb{P}[x]$$

判定非空集合是否为线性空间,也要验算运算的封闭性以及 8 条运算律,那是"相当地麻烦". 至于判定线性空间 V 的子集 U 是否为线性空间,就比较方便了. 因为作为子集,U 中自然保留了(A1)、(A2)、(M1)、(M2),以及(D1)、(D2),剩下的要求就是"两种运算封闭"以及(A3)、(A4). 如果对数乘运算封闭,只要分别令 $k=0,-1$,就得到了(A3)、(A4). 这样,要想将 U 打造成"二八佳人",原来如此轻松. 究其原因,全赖"美丽是遗传的".

定理 2.3.1　**(子空间判别法)**数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间 V 的非空子集 U 是 V 的子空间的充要条件是 U 对 V 中的运算都封闭,即对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in U$ 和任意 $k \in \mathbb{F}$,都有 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta} \in U$ 和 $k\boldsymbol{\alpha} \in U$.

"两种运算封闭"可以合并为:对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in U$ 和任意 $k,l \in \mathbb{F}$,都有 $k\boldsymbol{\alpha}+l\boldsymbol{\beta} \in U$.

显然,线性空间 V 是它自己的子空间,而只有零元 $\boldsymbol{\theta}$ 的零空间 $\{\boldsymbol{\theta}\}$ 是所有线性空间的子空间.

例 2.3.2　$\mathbb{C}^1[a,b]$ 是 $\mathbb{C}[a,b]$ 的子空间,$\mathbb{C}^2[a,b]$ 又是 $\mathbb{C}[a,b]$ 的子空间……即有

$$\mathbb{C}^\infty[a,b] \subset \cdots \subset \mathbb{C}^2[a,b] \subset \mathbb{C}^1[a,b] \subset \mathbb{C}^0[a,b]=\mathbb{C}[a,b]$$

例 2.3.3　$\mathbb{SR}^{n\times n}$ 是 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的子空间,$\mathbb{SSR}^{n\times n}$ 也是 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的子空间.

例 2.3.4 对任意 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$，显然可知 $N(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的子空间，而 $R(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{R}^m$ 的子空间.

例 2.3.5 已知数域 $\mathbb{F}$上的线性空间 V，则向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s \in V$ 的线性组合的集合

$$W = \{\boldsymbol{x} = k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_s\boldsymbol{\alpha}_s \mid k_1,k_2,\cdots,k_s \in \mathbb{F}\}$$

是 V 的一个子空间，称为由向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 所张成的子空间，记为 $\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$ 或 $L(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$. 注意向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 不一定是线性无关的.

定理 2.3.2 数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的两个子空间 V_1,V_2 的交 $V_1 \cap V_2$ 也是 V 的子空间.

线性空间 V 的两个子空间的并是不是子空间呢？很遗憾，“这回真不是！”例如在 $\mathbb{R}^2$ 中，令 $\boldsymbol{i} = (1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{j} = (0,1)^{\mathrm{T}}$，则 $\mathrm{span}(\boldsymbol{i})$（即 x 轴）和 $\mathrm{span}(\boldsymbol{j})$（即 y 轴）都是 $\mathbb{R}^2$ 的子空间，但 $W = \mathrm{span}(\boldsymbol{i}) \cup \mathrm{span}(\boldsymbol{j})$ 显然不是子空间，因为它对加法不封闭，比如 $\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j} = (1,1)^{\mathrm{T}} \notin W$.

那么包含两个子空间的最小子空间是谁呢？考虑到它必须对加法封闭，因此我们需要研究两者的和.

定义 2.3.2 **（子空间的和）**设 V_1,V_2 是数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的两个子空间，则称集合

$$\{\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2 \mid \boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1, \boldsymbol{\alpha}_2 \in V_2\}$$

为子空间 V_1 与 V_2 的**和**(sum)，记为 $V_1 + V_2$.

定理 2.3.3 数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的两个子空间 V_1,V_2 的和 V_1+V_2 也是 V 的子空间.

证明：因为任意 $\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1 \subset V, \boldsymbol{\alpha}_2 \in V_2 \subset V$，因此 $\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2 \in V$. 另外，由 $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{\theta}$ 可知 $\boldsymbol{\theta} \in V_1+V_2$，故 V_1+V_2 是 V 的非空子集.

对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V_1+V_2$，由定义，存在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\beta}_1 \in V_1$ 及 $\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_2 \in V_2$，使得 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$，$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2$. 由于 $\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\beta}_1 \in V_1, \boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\beta}_2 \in V_2$，故

$$\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)+(\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2) = (\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\beta}_1)+(\boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\beta}_2) \in V_1+V_2$$

对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V_1+V_2$ 及任意 $k \in \mathbb{F}$，显然存在 $\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1$ 及 $\boldsymbol{\alpha}_2 \in V_2$，使得 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$. 由于 $k\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1, k\boldsymbol{\alpha}_2 \in V_2$，故 $k\boldsymbol{\alpha} = k(\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2) = k\boldsymbol{\alpha}_1+k\boldsymbol{\alpha}_2 \in V_1+V_2$. 从而 V_1+V_2 也是 V 的子空间. 证毕.

可以验证，子空间的交与和满足交换律和结合律. 因此定理 2.3.2 和定理 2.3.3 可推广如下：

定理 2.3.4 数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的子空间 $V_1,V_2,\cdots,V_s$ 的交 $V_1 \cap V_2 \cap \cdots \cap V_s$ 与和 $V_1+V_2+\cdots+V_s$ 也是 V 的子空间.

从生成元角度看，定理 2.3.2 意味着将子空间的生成元合并在一起，就成了和空间的生成元，即如下定理：

定理 2.3.5 设 V_1,V_2 都是线性空间 V 的子空间，且

$$V_1 = \mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s), V_2 = \mathrm{span}(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_t)$$

则 $V_1+V_2=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_t)$.

例 2.3.6　已知 $\boldsymbol{\alpha}_1=(2,1,3,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(-1,1,-3,1)^{\mathrm{T}}$ 及 $\boldsymbol{\beta}_1=(4,5,3,-1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\beta}_2=(1,5,-3,1)^{\mathrm{T}}$，并且 $V_1=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$，$V_2=\text{span}(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)$. 求 $V_1\cap V_2$ 和 V_1+V_2 的基与维数.

解:设 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1\cap V_2$，则 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$ 且 $\boldsymbol{\alpha}\in V_2$，从而可分别令 $\boldsymbol{\alpha}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2$ 及 $\boldsymbol{\alpha}=l_1\boldsymbol{\beta}_1+l_2\boldsymbol{\beta}_2$，故 $k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+(-l_1)\boldsymbol{\beta}_1+(-l_2)\boldsymbol{\beta}_2=\mathbf{0}$，这实际上就是系数矩阵为 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)$、未知向量为 $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2,-l_1,-l_2)^{\mathrm{T}}$ 的齐次线性方程组 $\boldsymbol{Ak}=\mathbf{0}$. 由

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)=\begin{pmatrix}2&-1&4&1\\1&1&5&5\\3&-3&3&-3\\1&1&-1&1\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&5/3\\0&0&1&2/3\\0&0&0&0\end{pmatrix}$$

解得 $k_1=0$，$k_2=\frac{5}{3}l_2$，$l_1=-\frac{2}{3}l_2$，因此 $\boldsymbol{\alpha}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2=\frac{5}{3}l_2\cdot\boldsymbol{\alpha}_2$，这说明 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 为 $V_1\cap V_2$ 的基，即 $\dim(V_1\cap V_2)=1$.

由于

$$\begin{aligned}\mathbf{0}&=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+(-l_1)\boldsymbol{\beta}_1+(-l_2)\boldsymbol{\beta}_2\\&=0\cdot\boldsymbol{\alpha}_1+\frac{5}{3}l_2\cdot\boldsymbol{\alpha}_2+\frac{2}{3}l_2\cdot\boldsymbol{\beta}_1+(-l_2)\cdot\boldsymbol{\beta}_2\end{aligned}$$

也就是 $\boldsymbol{\beta}_2=0\cdot\boldsymbol{\alpha}_1+\frac{5}{3}\boldsymbol{\alpha}_2+\frac{2}{3}\boldsymbol{\beta}_1$，而 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1$ 线性无关，因此由定理 2.3.5 可知，

$$V_1+V_2=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1)$$

即 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1$ 是 V_1+V_2 的一组基，$\dim(V_1+V_2)=3$.

注意到例 2.3.6 中成立 $\dim(V_1\cap V_2)+\dim(V_1+V_2)=\dim(V_1)+\dim(V_2)$，这个结果并不是偶然和个别的，而是具有一般性.

定理 2.3.6　(维数公式，又称格拉斯曼公式) 设 V_1,V_2 是数域 F 上线性空间 V 的两个有限维子空间，则 $V_1\cap V_2$ 与 V_1+V_2 都是有限维的，并且

$$\dim(V_1\cap V_2)+\dim(V_1+V_2)=\dim(V_1)+\dim(V_2)$$

证明:令 $\dim(V_1)=k$，$\dim(V_2)=l$，$\dim(V_1\cap V_2)=m$，由于维数实质上就是线性空间的一组基中基向量的个数，因此我们从基入手. 取 $V_1\cap V_2$ 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m$，并分别扩充成 V_1 和 V_2 的一组基，即有

$$V_1=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_{k-m}),V_2=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\gamma}_1,\boldsymbol{\gamma}_2,\cdots,\boldsymbol{\gamma}_{l-m})$$

所以 $V_1+V_2=\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_{k-m},\boldsymbol{\gamma}_1,\boldsymbol{\gamma}_2,\cdots,\boldsymbol{\gamma}_{l-m})$.

设

$$k_1\boldsymbol{\alpha}_1+\cdots+k_m\boldsymbol{\alpha}_m+p_1\boldsymbol{\beta}_1+\cdots+p_{k-m}\boldsymbol{\beta}_{k-m}+q_1\boldsymbol{\gamma}_1+\cdots+q_{l-m}\boldsymbol{\gamma}_{l-m}=\boldsymbol{\theta}\quad(2.3.1)$$

并令 $\boldsymbol{\alpha}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_m\boldsymbol{\alpha}_m+p_1\boldsymbol{\beta}_1+p_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+p_{k-m}\boldsymbol{\beta}_{k-m}$，则 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$. 又由式(2.3.1)知

$$\boldsymbol{\alpha}=-(q_1\boldsymbol{\gamma}_1+q_2\boldsymbol{\gamma}_2+\cdots+q_{l-m}\boldsymbol{\gamma}_{l-m}) \tag{2.3.2}$$

即 $\boldsymbol{\alpha}\in V_2$. 因此 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1\cap V_2$. 从而又可令 $\boldsymbol{\alpha}=l_1\boldsymbol{\alpha}_1+l_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+l_m\boldsymbol{\alpha}_m$. 这样，$\boldsymbol{\alpha}$ 的两种表示相等，即

$$l_1\boldsymbol{\alpha}_1+l_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+l_m\boldsymbol{\alpha}_m=-(q_1\boldsymbol{\gamma}_1+q_2\boldsymbol{\gamma}_2+\cdots+q_{l-m}\boldsymbol{\gamma}_{l-m})$$

注意到 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\gamma}_1,\boldsymbol{\gamma}_2,\cdots,\boldsymbol{\gamma}_{l-m}$ 线性无关，这意味着

$$k_1=k_2=\cdots=k_m=q_1=q_2=\cdots=q_{l-m}=0$$

代入式(2.3.2)，可知 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$，也就是

$$\boldsymbol{\alpha}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_m\boldsymbol{\alpha}_m+p_1\boldsymbol{\beta}_1+p_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+p_{k-m}\boldsymbol{\beta}_{k-m}=\boldsymbol{\theta}$$

再由 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_{k-m}$ 线性无关，可知

$$k_1=k_2=\cdots=k_m=p_1=p_2=\cdots=p_{k-m}=0$$

至此已推得

$$k_1=k_2=\cdots=k_m=p_1=p_2=\cdots=p_{k-m}=q_1=q_2=\cdots=q_{l-m}=0$$

从而向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_{k-m},\boldsymbol{\gamma}_1,\boldsymbol{\gamma}_2,\cdots,\boldsymbol{\gamma}_{l-m}$ 线性无关，所以它是 V_1+V_2 的一组基，即 $\dim(V_1+V_2)=k+l-m$. 证毕.

2.3.2　子空间的直和

维数公式告诉我们，和空间的维数不超过各子空间的维数之和. 那么等号何时成立呢？由维数公式，此时 $\dim(V_1\cap V_2)=0$，即 $V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$.

定义 2.3.3　设 V_1,V_2 是数域 $\mathbb{F}$ 上线性空间 V 的两个子空间，如果

$$V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$$

则称和 V_1+V_2 为**直和**(direct sum)，记为 $V_1\oplus V_2$.

定理 2.3.7　设 V_1,V_2 是数域 $\mathbb{F}$ 上线性空间 V 的两个子空间，则下列命题是等价的：

(1)和 V_1+V_2 是直和；

(2) $\dim(V_1+V_2)=\dim(V_1)+\dim(V_2)$；

(3)和 V_1+V_2 中零元 $\boldsymbol{\theta}$ 的表示法唯一，即若有 $\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\theta}$，其中 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V_1,\boldsymbol{\alpha}_2\in V_2$，则必有 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\theta}$；

(4)和 V_1+V_2 中每个向量的表示法是唯一的.

证明：显然(1)与(2)等价，且(4) $\Rightarrow$ (3). 下证(1) $\Rightarrow$ (4)及(3) $\Rightarrow$ (1).

(1) $\Rightarrow$ (4). 设 $V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$，如果对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1+V_2$，有 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}_1'+\boldsymbol{\alpha}_2'$，其中 $\boldsymbol{\alpha}_1$、$\boldsymbol{\alpha}'_1\in V_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2$、$\boldsymbol{\alpha}'_2\in V_2$. 由于 $\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}'_1\in V_1,\boldsymbol{\alpha}'_2-\boldsymbol{\alpha}_2\in V_2$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}'_1=\boldsymbol{\alpha}'_2-\boldsymbol{\alpha}_2$，故

$$\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}_1'=\boldsymbol{\alpha}_2'-\boldsymbol{\alpha}_2\in V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$$

此即 $\boldsymbol{\alpha}_1-\boldsymbol{\alpha}_1'=\boldsymbol{\alpha}_2'-\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\theta}$，从而 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha}_1'$，$\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}_2'$.

(3) $\Rightarrow$ (1). 对任意向量 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1\cap V_2$，有 $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\alpha}+(-\boldsymbol{\alpha})$，这里 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$，$-\boldsymbol{\alpha}\in V_2$. 再由(3)，零向量的表示法 $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{\theta}$ 是唯一的，因此 $\boldsymbol{\alpha}=-\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$. 由 $\boldsymbol{\alpha}$ 的任意性可知 $V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$. 证毕.

显然直和的概念及其结论可以推广到多个子空间的情形.

例 2.3.7　证明 $\mathbb{R}^{n\times n}=\mathbb{SR}^{n\times n}\oplus\mathbb{SSR}^{n\times n}$.

证明：因为任意实方阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 可以分解为一个实对称矩阵和一个实反对称矩阵的和，即

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})+\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\equiv\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C}$$

显然，$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{C}$，即 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{SR}^{n\times n}$，$\boldsymbol{C}\in\mathbb{SSR}^{n\times n}$. 这说明 $\mathbb{R}^{n\times n}=\mathbb{SR}^{n\times n}+\mathbb{SSR}^{n\times n}$ 成立. 下证此和为直和.

证法一：对任意矩阵 $\boldsymbol{D}\in\mathbb{SR}^{n\times n}\cap\mathbb{SSR}^{n\times n}$，有 $\boldsymbol{D}\in\mathbb{SR}^{n\times n}$ 且 $\boldsymbol{D}\in\mathbb{SSR}^{n\times n}$，故 $\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{D}$ 且 $\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{D}$，从而 $\boldsymbol{D}=-\boldsymbol{D}$，解得 $\boldsymbol{D}$ 为零矩阵，即 $\mathbb{SR}^{n\times n}\cap\mathbb{SSR}^{n\times n}=\{\boldsymbol{O}\}$，因而 $\mathbb{R}^{n\times n}=\mathbb{SR}^{n\times n}\oplus\mathbb{SSR}^{n\times n}$.

证法二：由式 (2.2.8) 和例 2.2.17 可知，$\dim\mathbb{R}^{n\times n}=n^2$，$\dim\mathbb{SR}^{n\times n}=\frac{1}{2}n(n+1)$，再由习题 2.12，$\dim\mathbb{SSR}^{n\times n}=\frac{1}{2}n(n-1)$. 注意到 $n^2=\frac{1}{2}n(n+1)+\frac{1}{2}n(n-1)$，故 $\dim\mathbb{R}^{n\times n}=\dim\mathbb{SR}^{n\times n}+\dim\mathbb{SSR}^{n\times n}$，因此由定理 2.3.7 即得 $\mathbb{R}^{n\times n}=\mathbb{SR}^{n\times n}\oplus\mathbb{KR}^{n\times n}$. 证毕.

证法一比较简单，但只适用于判断两个子空间是否存在直和分解；证法二虽然复杂，却适用于任意个子空间.

定理 2.3.8 （直和分解） 设 V_1 是数域 $\mathbb{F}$上的 n 维线性空间 V 的一个 m 维子空间 $(n\geqslant m)$，则一定存在 V 的另一个 $n-m$ 维子空间 V_2，使得空间 V 具有**直和分解**(direct sum decomposition)

$$V=V_1\oplus V_2$$

并且若 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m$ 为 V_1 的一组基，$\boldsymbol{\alpha}_{m+1},\boldsymbol{\alpha}_{m+2},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为 V_2 的一组基，则

$$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_m,\boldsymbol{\alpha}_{m+1},\boldsymbol{\alpha}_{m+2},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$$

为 V 的一组基.

证明：利用基的扩张定理即可. 具体请读者完成.

我们称这样的 V_1 和 V_2 是一对**互补的子空间**(complemented subspace)，或者称 V_2 是 V_1 的**补子空间**(complement subspace). 显然，我们可以根据需要对线性空间做各种各样的直和分解.

直和分解也可以推广到多个子空间的情形.

注意：(1)子空间的补子空间未必是唯一的，也就是说，线性空间的直和分解未必是唯一的. 例如：若 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\beta}_1=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\beta}_2=(0,1,1)^{\mathrm{T}}$. 显然，

$U = \text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2)$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的一个子空间,几何上很容易看出, $\text{span}(\boldsymbol{\beta}_1)$ 和 $\text{span}(\boldsymbol{\beta}_2)$ 都是 U 的补子空间.

(2)三个子空间即便两两直和,这三个子空间的和也未必是直和. 例如,若

$$V_1 = \{\boldsymbol{x} = a\,(1,0,0)^{\mathrm{T}}, a \in \mathbb{R}\}$$
$$V_2 = \{\boldsymbol{x} = a\,(0,1,0)^{\mathrm{T}}, a \in \mathbb{R}\}$$
$$V_3 = \{\boldsymbol{x} = a\,(1,1,0)^{\mathrm{T}}, a \in \mathbb{R}\}$$

显然, $V_1 \cap V_2 = V_1 \cap V_3 = V_2 \cap V_3 = \{\boldsymbol{0}\}$,但是

$$\boldsymbol{0} = (0,0,0)^{\mathrm{T}} = 1 \cdot (1,0,0)^{\mathrm{T}} + 1 \cdot (1,0,0)^{\mathrm{T}} - 1 \cdot (1,1,0)^{\mathrm{T}}$$

也就是说,零向量的分解不唯一,因此 $\mathbb{R}^3 \neq V_1 \oplus V_2 \oplus V_3$.

下面我们不加证明地将定理 2.3.7 推广到多个子空间的情形.

定理 2.3.9 设 $V_1, V_2, \cdots, V_s$ 是数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的 s 个子空间,则下列命题是等价的:

(1)和 $V_1 + V_2 + \cdots + V_s$ 是直和;

(2) $\dim(V_1 + V_2 + \cdots + V_s) = \dim V_1 + \dim V_2 + \cdots + \dim V_s$;

(3)和 $V_1 + V_2 + \cdots + V_s$ 的一组基为

$$\boldsymbol{\alpha}_{11}, \boldsymbol{\alpha}_{12}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{1r_1}, \boldsymbol{\alpha}_{21}, \boldsymbol{\alpha}_{22}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{2r_2}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{s1}, \boldsymbol{\alpha}_{s2}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{sr_s}$$

这里 $\dim V_i = r_i$, 且 $\boldsymbol{\alpha}_{i1}, \boldsymbol{\alpha}_{i2}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_{ir_i}$ 是 V_i 的一组基($i = 1, 2, \cdots, s$).

例 2.3.8 实数域 $\mathbb{R}$ 上的多项式空间 $\mathbb{P}[x]_n$ 有下列直和分解:

$$\mathbb{P}[x]_n = \text{span}(1) \oplus \text{span}(x) \oplus \text{span}(x^2) \oplus \cdots \oplus \text{span}(x^{n-1})$$

例 2.3.9 $\mathbb{R}^n = \text{span}(\boldsymbol{e}_1) \oplus \text{span}(\boldsymbol{e}_2) \oplus \text{span}(\boldsymbol{e}_3) \oplus \cdots \oplus \text{span}(\boldsymbol{e}_n)$, 其中 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ 为 n 阶单位矩阵的列向量组,称为 $\mathbb{R}^n$ **的标准基**.

定理 2.3.10 设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots \boldsymbol{\alpha}_n$ 是数域 $\mathbb{F}$上线性空间 V 的一组基,则

$$V = \text{span}(\boldsymbol{\alpha}_1) \oplus \text{span}(\boldsymbol{\alpha}_2) \oplus \cdots \oplus \text{span}(\boldsymbol{\alpha}_n) \tag{2.3.3}$$

显然,式 (2.3.1) 是对线性空间 V 最彻底的直和分解,此时 V 中每一个向量在每个 $\text{span}(\boldsymbol{\alpha}_i)$ 中都存在一个分量,从而将 V 中向量的线性运算化归到各个子空间中,这显然与坐标方法有异曲同工之妙.

2.4 线性变换及其矩阵表示

线性变换是线性空间的核心内容,反映的是线性空间中元素间的一种基本联系,体现出一种"动态的"或者"直观的"视角. 借助"基"的概念,可在线性变换与矩阵之间建立一一对应关系,从而将线性变换的运算转化为矩阵的运算. 一言以蔽之,"变换即矩阵".

2.4.1 几个简单的线性变换

让我们从几何直观开始. 观察图 2-15,图形经过反射变换(图 b)或旋转变换(图 f),

只是位置改变了，形状和大小都没有改变，所有的长度、角度都保持不变，直线仍然变成了直线，三角形、长方形、正方形、平行四边形、圆仍然变成了三角形、长方形、正方形、平行四边形、圆，也就是说，变换前后的图形是全等的. 而在剩下的图形中，图形经过伸缩变换（图 c 和图 d）及 Shear 切变（图 e）后，虽然位置没有改变，而且直线仍然变成了直线，三角形、平行四边形仍然变成了三角形、平行四边形，但图形的长度、角度、形状和大小都有所改变，正方形变成了长方形乃至平行四边形，圆变成了椭圆，也就是说，变换前后的图形未必是全等的.

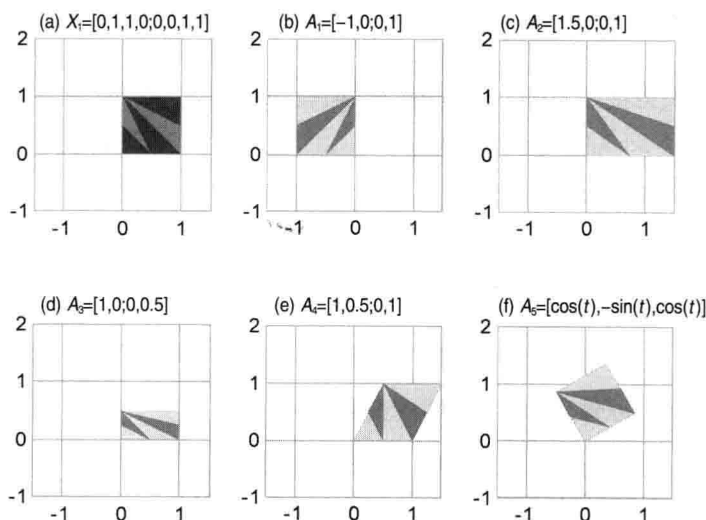


图 2-15　几种简单的线性变换

接下来我们逐一深入研究.

例 2.4.1　**（旋转变换或 Givens 变换）**将 $\mathbb{R}^2$ 中的任意向量 $\overrightarrow{OP}=(\xi_1,\xi_2)$ 绕原点逆时针旋转角 θ 至 $\overrightarrow{OP'}=(\eta_1,\eta_2)$（见图 2-16），显然

$$\eta_1=r\cos(\alpha+\theta)=r\cos\alpha\cos\theta-r\sin\alpha\sin\theta=\xi_1\cos\theta-\xi_2\sin\theta$$
$$\eta_2=r\sin(\alpha+\theta)=r\sin\alpha\cos\theta+r\cos\alpha\sin\theta=\xi_2\cos\theta+\xi_1\sin\theta$$

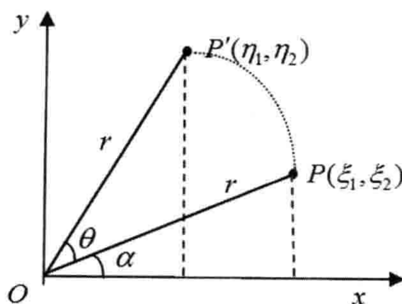


图 2-16　Givens 旋转变换

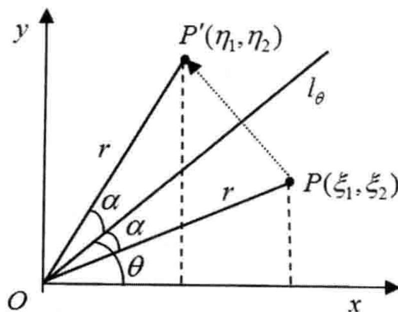


图 2-17　Householder 反射变换

因此像 (η_1,η_2) 与原像 (ξ_1,ξ_2) 之间的关系为

$$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}\equiv \boldsymbol{G}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} \tag{2.4.1}$$

其中,矩阵 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{G}(\theta)$,称为 **Givens 矩阵**. 显然在图 2-15(f)中,$\theta=\pi/6$.

特别地,当 $\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$ 时,$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \sin\theta\end{pmatrix}$;当 $\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$ 时,$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\sin\theta\\ \cos\theta\end{pmatrix}$.

思考:角度 θ 为何值时,可使得 $\eta_2=0$? 这在几何上意味着什么? 你觉得这种变换有意义吗?

例 2.4.2　(反射变换或 Householder 变换)设向量 l_θ 为 $\mathbb{R}^2$ 中与 x 轴正向夹角为 θ 且过原点的向量. 将 $\mathbb{R}^2$ 中的任意向量 $\overrightarrow{OP}=(\xi_1,\xi_2)$ 以 l_θ 为轴反射至 $\overrightarrow{OP'}=(\eta_1,\eta_2)$(见图 2-17). 显然

$$\begin{aligned}\eta_1&=r\cos(\alpha+\theta)=r\cos(2\theta-(\theta-\alpha))=r\cos(\theta-\alpha)\cos2\theta+r\sin(\theta-\alpha)\sin2\theta\\ &=\xi_1\cos2\theta+\xi_2\sin2\theta\\ \eta_2&=r\sin(\alpha+\theta)=r\cos(\theta-\alpha)\sin2\theta-r\sin(\theta-\alpha)\cos2\theta=\xi_1\sin2\theta-\xi_2\cos2\theta\end{aligned}$$

因此像 (η_1,η_2) 与原像 (ξ_1,ξ_2) 之间的关系为

$$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos2\theta & \sin2\theta\\ \sin2\theta & -\cos2\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}\equiv \boldsymbol{H}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} \tag{2.4.2}$$

其中,矩阵 $\boldsymbol{H}$ 称为**初等反射矩阵**或 **Householder 矩阵**. 显然,在图 2-15(b)中,$\theta=\pi/2$.

从映射的角度看,旋转变换和反射变换仍然是同构映射.

例 2.4.3　(伸缩变换, stretching transformation 或 dilation transformation)将 $\mathbb{R}^2$ 中的任意向量 $\overrightarrow{OP}=(\xi_1,\xi_2)$ 的两个分量分别拉伸 a 倍和 b 倍后变成 $\overrightarrow{OP}'=(\eta_1,\eta_2)$,显然,这时像 (η_1,η_2) 与原像 (ξ_1,ξ_2) 之间的关系为

$$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}\equiv \boldsymbol{D}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} \tag{2.4.3}$$

其中,矩阵 $\boldsymbol{D}$ 是对角矩阵. 经过此变换,显然,单位圆 $x^2+y^2=1$ 变成了椭圆 $\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}=1$. 特别地,$a=1.5,b=1$ 对应图 2-15(c),$a=1,b=0.5$ 对应图 2-15(d). 从映射的角度看,伸缩变换显然也是同构映射.

作为对比,我们再介绍两个特殊变换.

例 2.4.4　(投影变换, projective transformation)考察 $\mathbb{R}^3$ 中的投影变换

$$\mathcal{P}:(x,y,z)\mapsto(x,y,0) \tag{2.4.4}$$

显然,$\mathcal{P}$将椭球体 $\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$ 变换成 xoy 平面中的椭圆 $\frac{x'^2}{a^2}+\frac{y'^2}{b^2}=1, z'=0$,即

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{P}$ 称为**投影矩阵**(**projective matrix**).

从映射的角度看，上面的投影变换仅仅是同态映射，不是同构映射. 因为 $\mathbb{R}^3$ 中任何与 z 轴平行的直线上的点都被压缩到该直线与 xoy 平面的交点处，这使得 $\mathbb{R}^3$ 中大量的向量都对应同一个向量. 当然，这个投影变换也导致我们完全丢失了第三个维度的信息.

例 2.4.5　**(分形蕨)**图 2－18 是运行文献[110]中提供的程序 fern 所得的结果，显然可以看成右下方的子蕨被不断收缩并往上平移，同时这个子蕨被反射到茎干左侧后也如法炮制. 事实上，fern 的代码中涉及了**仿射变换**(affine transformation) $\mathcal{A}: \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}$. 由例 2.2.18 可知仿射变换$\mathcal{A}$不是线性变换.


图 2－18　分形蕨

可以证明，旋转变换、反射变换和平移变换是 $\mathbb{R}^2$ 中三种最基本的全等变换(congruent transformation，又称合同变换). 在合同变换下，直线变为直线，线段变为线段，射线变为射线，三角形、多边形和圆分别变为与它们全等的三角形、多边形和圆；两直线的平行性、垂直性，所成的角度都不变；共线点变为共线点，且保持顺序关系不变；直线上 A、B、C 三点的简比 $AC : BC$ 不变；封闭图形的面积不变. 遗憾的是，平移变换却不是线性变换，而伸缩变换、投影变换等反而是线性变换，这无疑给线性变换披上了神秘的面纱.

2.4.2　线性变换及其性质

2.2.4 小节中已指出，线性空间 V_1 到 V_2 的(线性)同态映射也称为线性映射. 线性空间 V 到自身的自同态映射也称为线性变换. 由于同态概念的适用范围更广(比如群的同态)，因此在线性代数中，我们更垂青于名词“线性映射”与“线性变换”. 下面对它们进行深入研究.

定义 2.4.1　**(线性映射和线性变换)** 设 V_1, V_2 是数域 $\mathbb{F}$上的两个线性空间，$\mathcal{T}: V_1 \mapsto V_2$ 是 V_1 到 V_2 的映射(未必是双射)，如果对任意的 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in V_1$ 和任意的 $k \in \mathbb{F}$，都有

(1)可加性：$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\beta}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) + \mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})$；

(2)齐次性：$\mathcal{T}(k\boldsymbol{\alpha}) = k\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$；

或合在一起，就是

(3)线性性：$\mathcal{T}(k\boldsymbol{\alpha} + l\boldsymbol{\beta}) = k\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) + l\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})$，$\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in V_1$，$k, l \in \mathbb{F}$，则称 $\mathcal{T}$ 是 V_1 到 V_2 的**线性映射**，并称 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 $\mathcal{T}$ 下的像，称 $\boldsymbol{\alpha}$ 是 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$ 的原像.

特别地，如果 $V_1 = V_2 = V$，则称 $\mathcal{T}$ 是 V (在数域 $\mathbb{F}$)上的**线性变换**；如果 $V_1 = V$，$V_2 = \mathbb{F}$，则称 $\mathcal{T}$ 是 V (在数域 $\mathbb{F}$)上的**线性泛函**.

显然上一小节的几个线性变换，有的可以推广到任意线性空间 V (比如投影变换和反射变换).

思考:易知二次型和迹都是矩阵空间 $\mathbb{R}^{n\times n}$（在实数域 $\mathbb{R}$）上的线性泛函，那么矩阵的秩是不是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 上的线性泛函？方阵的行列式呢？

例 2.4.6 将线性空间 V_1 中每个向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 映射成线性空间 V_2 中的零向量 $\boldsymbol{\theta}'$ 的映射是一个线性映射，称为零映射，记为 $\mathcal{O}$，即 $\mathcal{O}(\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\theta}'$，这里任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$. 当 $V_1=V_2=V$ 时，称零映射为**零变换**，仍记为 $\mathcal{O}$.

例 2.4.7 将线性空间 V 中每个向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 映射成它的常数倍的线性映射是一个线性变换，称为**标量变换**(scalar transformation)或**数乘变换**，记为 $\mathcal{K}$，即 $\mathcal{K}(\boldsymbol{\alpha})=k\boldsymbol{\alpha}$，这里 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$，$k\in\mathbb{F}$. 特别地，当 $k=1$ 时称为**恒等变换**，记为 $\mathcal{I}$；当 $k=0$ 时就是零变换 $\mathcal{O}$.

例 2.4.8 **(微分变换,differential transformation)**设 V 为数域 $\mathbb{R}$ 上的无限次可微函数空间 $\mathbb{C}^{\infty}[a,b]$，则

$$\mathcal{D}(f(x))=f'(x),\ f(x)\in\mathbb{C}^{\infty}[a,b] \tag{2.4.5}$$

确定的微分变换 $\mathcal{D}$ 是 $\mathbb{C}^{\infty}[a,b]$ 上的一个线性变换.

思考:有限次可微的情况又如何？对多项式空间 $\mathbb{P}[x]_n$ 呢？

例 2.4.9 **(积分变换,integral transformation)**设 V 为数域 $\mathbb{R}$ 上的连续函数空间 $\mathbb{C}[a,b]$，则

$$\mathcal{J}(f(x))=\int_a^x f(t)\mathrm{d}t,\ f(x)\in\mathbb{C}[a,b]$$

确定的积分变换 $\mathcal{J}$ 是 $\mathbb{C}[a,b]$ 上的一个线性变换.

例 2.4.10 **(带核的积分变换)**设 V 为数域 $\mathbb{R}$ 上的连续函数空间 $\mathbb{C}[a,b]$，则

$$\mathcal{L}(s)=\int_a^b k(s,t)f(t)\mathrm{d}t,\ f(t)\in\mathbb{C}[a,b]$$

确定的积分变换 $\mathcal{L}$ 是**(积分)核**(integral kernel)为 $k(s,t)$ 的一个线性变换.

比如，**拉普拉斯变换**(Laplace transformation)

$$\mathcal{L}(s)=\int_0^{+\infty}\mathrm{e}^{-st}f(t)\mathrm{d}t,\ f(t)\in\mathbb{C}[0,+\infty)$$

就是 $\mathbb{C}[0,+\infty)$ 上(积分)核为 $k(s,t)=\mathrm{e}^{-st}$ 的积分变换.

例 2.4.8 和例 2.4.9 表明，微积分的两个基本运算(微分和积分)从变换的角度看，仅仅是两类特殊的线性变换或线性算子，由此可知线性变换的胸怀有多么宽广，在理论与应用中有着多么广泛的应用.

例 2.4.11 **(移位算子,shift operator)**对于 l^{∞} 中的任意数列 $\{x_n\}$，规定

$$\mathcal{B}_s x_n=x_{n-1}(n\geqslant 2),\ \mathcal{B}_s x_1=0;\ \mathcal{F}_s x_n=x_{n+1}$$

显然，可证 $\mathcal{B}_s$ 和 $\mathcal{F}_s$ 是 l^{∞} 中的线性算子，分别称为**前向移位算子**(forward shift operator)和**后向移位算子**(backward shift operator).

线性映射也具有和同构映射类似的一些性质.

定理 2.4.1 **(线性映射的基本性质)**设 $\mathcal{T}$ 是线性空间 V_1 到 V_2 的线性映射，$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,$

$\boldsymbol{\alpha}_s$ 是 V_1 中的任意向量组,则

(I1)(零元到零元):$\mathcal{T}(\boldsymbol{\theta})=\boldsymbol{\theta}'$, 其中 $\boldsymbol{\theta}'$ 为 V_2 中的零元.

(I2)(负元到负元):对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$, 有 $\mathcal{T}(-\boldsymbol{\alpha})=-\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$.

(I3)(叠加性或线性性):

$$\mathcal{T}(k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s)=k_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+k_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+k_s\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)$$

(I4a)(线性相关组到线性相关组):若 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 线性相关,则 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)$ 也线性相关;也就是说,若 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)$ 线性无关,则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 也线性无关.

(I5)(子空间到子空间):若 U 是 V_1 的子空间,$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 是 U 的一组基,则 U 中所有向量在 $\mathcal{T}$ 下的像的集合 $\mathcal{T}(U)$ 是 V_2 的子空间,并且 $\mathcal{T}(U)=\mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s))$.

证明:只证性质(I4a)和(I5).

(I4a)的证明:如果存在不全为零的一组数 $k_1,k_2,\cdots,k_s$, 使得 $k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s=\boldsymbol{\theta}$, 那么由叠加性即性质(I3)可知

$$k_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+k_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+k_s\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)=\mathcal{T}(k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s)=\boldsymbol{\theta}'$$

(I5)的证明:若 U 中任意向量可表示为 $\boldsymbol{\beta}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s$, 则由叠加性可知

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})=k_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+k_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+k_s\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)\in\mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s))$$

反之, $\mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s))$ 中任意向量可表示为 $\boldsymbol{\beta}'=k_1'\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+k_2'\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+k_s'\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)$, 同样由叠加性可知其原像为 $\boldsymbol{\beta}=k_1'\boldsymbol{\alpha}_1+k_2'\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s'\boldsymbol{\alpha}_s$ 且 $\boldsymbol{\beta}\in U$. 因此 $\mathcal{T}(U)$ 是 V_2 的子空间,且生成元为 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_s)$. 证毕.

当线性映射特殊化为线性变换时,性质(I1)说明线性变换保持线性空间的原点不变,这一点从图 2−15 中可清晰看出. 此性质再次说明,改变了原点位置的变换(例如平移)肯定不是线性变换. 另外,请读者一定要注意,非原点经过线性变换后也可能成为了原点,例如投影变换 就将 z 轴上的点都投影到原点.

性质(I2)则说明线性空间中任意一点 $\boldsymbol{\alpha}$ 的对称点 $-\boldsymbol{\alpha}$ 的像就是像的对称点. 例如在 $\mathbb{P}[x]_3$ 中,将多项式 $f(x)=ax^2+bx+c$ 的首项系数反号而其他系数不变的变换,实质上就是 $\mathbb{R}^3$ 中将点 (a,b,c) 沿 yoz 平面反射到点 $(-a,b,c)$, 即 $\mathbb{P}[x]_3$ 关于其 $n-1$ 维平面的反射变换.

至于(I4a),显然与同构映射不同,这是因为线性映射未必是一一对应的,如零映射 $\mathcal{O}$. 这自然让我们想到:什么样的条件才能使线性映射特殊化为同构映射?

定义 2.4.2　设 $\mathcal{T}:V_1\mapsto V_2$ 是线性空间 V_1 到 V_2 的线性映射. 称 V_1 在 $\mathcal{T}$ 下的所有像的集合 $\mathcal{T}(V_1)$ 为 $\mathcal{T}$ 的**值域**(range),记作 $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 或 $R(\mathcal{T})$, 称 V_2 中的零向量 $\boldsymbol{\theta}'$ 在 $\mathcal{T}$ 下的所有原像的集合为 $\mathcal{T}$ 的**核**(kernel),记作 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 或 $N(\mathcal{T})$, 即

$$\mathrm{Im}(\mathcal{T})\equiv R(\mathcal{T})\equiv\{\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})\mid\forall\boldsymbol{\alpha}\in V_1\}$$

$$\mathrm{Ker}(\mathcal{T})\equiv N(\mathcal{T})\equiv\{\boldsymbol{\alpha}\in V_1\mid\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\theta}'\}$$

易证 $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 是 V_2 的子空间, $Ker(\mathcal{T})$ 是 V_1 的子空间. 同时,由性质(I5)可知

$$\mathrm{Im}(\mathcal{T}) = \mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)) \tag{2.4.6}$$

这里 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 是 V_1 的一组基.

定义 2.4.3　设 $\mathcal{T}: V_1 \mapsto V_2$ 是线性空间 V_1 到 V_2 的线性映射,称 $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 的维数为 $\mathcal{T}$ 的秩(rank),记为 $\mathrm{rank}(\mathcal{T})$,称 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 的维数为 $\mathcal{T}$ 的亏或零度(nullity),记为 $\mathrm{null}(\mathcal{T})$.

例如,对投影变换 $\mathcal{P}$ 来说,$\mathrm{Im}(\mathcal{P})$ 就是 $\mathbb{R}^3$ 中的 xoy 平面,$\mathrm{rank}(\mathcal{P}) = 2$,即经过投影变换,$\mathbb{R}^3$ 损失了 1 个维度.同时,$\mathrm{Ker}(\mathcal{P})$ 就是 $\mathbb{R}^3$ 中的 z 轴,$\mathrm{null}(\mathcal{P}) = 1$,这也说明 $\mathbb{R}^3$ 损失的维度转移到了空间 $\mathrm{Ker}(\mathcal{P})$.

一般地,对线性空间 V_1 到 V_2 的线性映射 $\mathcal{T}$,设 $\mathrm{null}(\mathcal{T}) = r$,则可在 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 中取到一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r$,并按基的扩张定理,将之扩充为 V_1 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r, \boldsymbol{\alpha}_{r+1}, \boldsymbol{\alpha}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$.由式(2.4.6),并注意到 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_r)$ 都是 V_2 中的零向量 $\boldsymbol{\theta}'$,显然有

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}(\mathcal{T}) &= \mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_r), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+1}), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+2}), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)) \\ &= \mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+1}), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+2}), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n))\end{aligned}$$

我们自然要接着问:$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+1}), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+2}), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)$ 是线性无关的吗?答案是 yes!事实上,设

$$k_{r+1}\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+1}) + k_{r+2}\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+2}) + \cdots + k_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n) = \boldsymbol{\theta}'$$

则由叠加性可知 $\mathcal{T}(k_{r+1}\boldsymbol{\alpha}_{r+1} + k_{r+2}\boldsymbol{\alpha}_{r+2} + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n) = \boldsymbol{\theta}'$,即向量 $k_{r+1}\boldsymbol{\alpha}_{r+1} + k_{r+2}\boldsymbol{\alpha}_{r+2} + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n \in \mathrm{Ker}(\mathcal{T})$,因此可将之表示为

$$k_{r+1}\boldsymbol{\alpha}_{r+1} + k_{r+2}\boldsymbol{\alpha}_{r+2} + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n = k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_r\boldsymbol{\alpha}_r$$

注意到,$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 线性无关,故可得 $k_1 = k_2 = \cdots = k_n = 0$.因此 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+1})$,$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{r+2}), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)$ 是线性无关的,即 $\mathrm{rank}(\mathcal{T}) = n - r$!

定理 2.4.2　(秩+零度定理)设 $\mathcal{T}$ 是 n 维线性空间 V_1 到 m 维线性空间 V_2 的线性映射,$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 是 V_1 的一组基,则:

(1) $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 和 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 都是 $\mathcal{T}$ 的子空间;

(2) $\mathrm{Im}(\mathcal{T}) = \mathrm{span}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1), \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2), \cdots, \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n))$;

(3) $\mathrm{rank}(\mathcal{T}) + \mathrm{null}(\mathcal{T}) = n$,即

$$\dim(\mathrm{Im}(\mathcal{T})) + \dim(\mathrm{Ker}(\mathcal{T})) = n \tag{2.4.7}$$

根据式(2.4.7),显然,当且仅当 $\mathrm{null}(\mathcal{T}) = 0$,即 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 为零空间时,线性映射 $\mathcal{T}$ 特殊化为同构映射,这也意味着此时 $\mathrm{rank}(\mathcal{T}) = n$.特别地,当 $\mathcal{T}$ 是 n 维线性空间 V 上的线性变换时,$\mathrm{rank}(\mathcal{T}) = n$ 意味着 $\mathrm{Im}(\mathcal{T}) = V$,我们称此时的 $\mathcal{T}$ 为**满秩线性变换**,否则就称为**降秩线性变换**.

虽然 $\dim(\mathrm{Im}(\mathcal{T})) + \dim(\mathrm{Ker}(\mathcal{T})) = n$,但一般地 $\mathrm{Im}(\mathcal{T}) + \mathrm{Ker}(\mathcal{T}) \neq V$,例如对 $\mathbb{P}[x]_n$ 上的微分变换 $\mathcal{D}: f \mapsto f'$,有 $\mathrm{Im}(\mathcal{D}) = \mathbb{P}[x]_{n-1}$,$\mathrm{Ker}(\mathcal{D}) = \mathbb{R}$,但显然 $\mathrm{Im}(\mathcal{D}) + \mathrm{Ker}(\mathcal{D}) = \mathbb{P}[x]_{n-1} \neq \mathbb{P}[x]_n$.

仔细再看看式(2.4.7),其中只涉及 V_1 的维数 n,这让 V_2 的维数 m 情何以堪!事实

上，m 已被深深雪藏，需要更精巧的工具才能揭示出来，详情下一小节揭晓.

回头再看投影变换 $\mathcal{P}$，任意向量 $\boldsymbol{\alpha}=(x,y,z)$ 被变换成 $\boldsymbol{\alpha}'=\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})=(x,y,0)$，显然，如果再用一个投影变换 $\mathcal{P}'$ 将像 $\boldsymbol{\alpha}'$ 投影到 x 轴，最终得到的是 $\boldsymbol{\alpha}''=(x,0,0)$，根据三垂线定理，这显然也可以看成 $\boldsymbol{\alpha}=(x,y,z)$ 被某个投影变换直接投影到 x 轴. 这说明两个线性变换可能会合成一个新的线性变换. 这与函数的复合显然类似，因此我们有必要研究线性变换乃至线性映射的运算.

设 $\mathcal{T},\mathcal{T}'$ 都是线性空间 V_1 到 V_2 上的线性映射，对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$ 及任意 $k\in\mathbb{F}$，分别定义 $\mathcal{T},\mathcal{T}'$ 的和 $\mathcal{T}+\mathcal{T}'$、数乘 $k\mathcal{T}$ 为

$$(\mathcal{T}+\mathcal{T}')(\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})+\mathcal{T}'(\boldsymbol{\alpha}),\ (k\mathcal{T})(\boldsymbol{\alpha})=k\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$$

显然，对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V_1$ 及任意 $p,q\in\mathbb{F}$，有

$$\begin{aligned}(\mathcal{T}+\mathcal{T}')(p\boldsymbol{\alpha}+q\boldsymbol{\beta})&=\mathcal{T}(p\boldsymbol{\alpha}+q\boldsymbol{\beta})+\mathcal{T}'(p\boldsymbol{\alpha}+q\boldsymbol{\beta})\\&=p\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})+p\mathcal{T}'(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}'(\boldsymbol{\beta})\\&=p(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})+\mathcal{T}'(\boldsymbol{\alpha}))+q(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})+\mathcal{T}'(\boldsymbol{\beta}))\\&=p(\mathcal{T}+\mathcal{T}')(\boldsymbol{\alpha})+q(\mathcal{T}+\mathcal{T}')(\boldsymbol{\beta})\end{aligned}$$

因此，$\mathcal{T}+\mathcal{T}'$ 是线性映射. 同理可证 $k\mathcal{T}$ 也是线性映射.

可以证明，$\mathcal{T}+\mathcal{T}'$、$k\mathcal{T}$ 也满足“八条运算规律”. 这意味着线性空间 V_1 到 V_2 上的所有线性映射的集合 $L(V_1,V_2)$ 也是线性空间(其零元就是零映射 $\mathcal{O}$). 当 $V_1=V_2=V$ 时，$L(V_1,V_2)$ 就简记为 $L(V)$，表示 V 上所有线性变换构成的线性空间(其零元就是零变换 $\mathcal{O}$). 这真是个“虚拟的二八佳人”或“数码美人”，因为 $L(V_1,V_2)$ 或 $L(V)$ 中的元素不是矩阵、多项式或函数之类的实体，而是似乎看不见也摸不着的线性映射或线性变换. 事实上，如果将 V 特殊化为 $\mathbb{R}$，那么 $L(V)$ 就是 $\mathbb{R}$ 上所有的线性函数构成的线性空间.

提到函数，我们自然联想到反函数，这就要定义线性映射的乘积. 如果 $\mathcal{T}\in L(V_1,V_2)$，而 $\mathcal{T}'\in L(V_2,V_3)$，则 $\mathcal{T},\mathcal{T}'$ 的乘法 $\mathcal{T}'\mathcal{T}$ 定义为

$$(\mathcal{T}'\mathcal{T})(\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{T}'(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})),\ \boldsymbol{\alpha}\in V_1$$

同样可证乘积 $\mathcal{T}'\mathcal{T}$ 是线性空间 V_1 到 V_3 的线性映射. 线性映射的乘法也满足结合律和两个分配律.

特别地，对于线性变换 $\mathcal{T}\in L(V)$，我们可定义 $\mathcal{T}$ 的幂为

$$\mathcal{T}^0=\mathcal{I},\mathcal{T}^m=\mathcal{T}\mathcal{T}^{m-1}\quad(m\geqslant 1)$$

对于多项式 $f(\mathcal{T})=a_m\mathcal{T}^m+a_{m-1}\mathcal{T}^{m-1}+\cdots+a_1\mathcal{T}+a_0\in\mathbb{P}[t]$，可类似地定义变换 $\mathcal{T}\in L(V)$ 的多项式 $f(\mathcal{T})$ 为

$$f(\mathcal{T})=a_m\mathcal{T}^m+a_{m-1}\mathcal{T}^{m-1}+\cdots+a_1\mathcal{T}+a_0\mathcal{I}$$

对线性映射的乘法来说，恒等变换 $\mathcal{I}$ 显然起到了数的乘法中 1 的效果，即 $\mathcal{I}_{V_2}\mathcal{T}=\mathcal{T}\mathcal{I}_{V_1}=\mathcal{T}$，这里 $\mathcal{T}\in L(V_1,V_2)$. 进一步地，我们可引入可逆线性映射的概念.

定理 2.4.3　(可逆线性映射) 设 $T\in L(V_1,V_2)$. 如果 $\mathcal{T}$ 是可逆映射，则其逆映射 $\mathcal{T}^{-1}$ 也是线性映射，且 $\mathcal{T}^{-1}\in L(V_2,V_1)$.

证明： 显然 $\mathcal{T}\mathcal{T}^{-1}=\mathcal{I}_{V_2}, \mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}=\mathcal{I}_{V_1}$. 因此对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V_1$ 及任意 $p,q\in\mathbb{F}$，有

$$\begin{aligned}\mathcal{T}^{-1}(p\boldsymbol{\alpha}+q\boldsymbol{\beta}) &= \mathcal{T}^{-1}(\mathcal{I}_{V_2}(p\boldsymbol{\alpha}+q\boldsymbol{\beta})) = \mathcal{T}^{-1}(p\mathcal{I}_{V_2}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{I}_{V_2}(\boldsymbol{\beta}))\\ &= \mathcal{T}^{-1}(p(\mathcal{T}\mathcal{T}^{-1})(\boldsymbol{\alpha})+q(\mathcal{T}\mathcal{T}^{-1})(\boldsymbol{\beta}))\\ &= \mathcal{T}^{-1}(p\mathcal{T}(\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\alpha}))+q\mathcal{T}(\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\beta})))\\ &= \mathcal{T}^{-1}(\mathcal{T}(p\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\beta})))\\ &= (\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T})(p\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\beta})))\\ &= \mathcal{I}_{V_1}(p\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\beta}))) = p\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\alpha})+q\mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\beta})\end{aligned}$$

证毕.

由定理 2.2.5 可知，$\mathcal{T}$ 是线性空间 V_1 到 V_2 的可逆线性映射，等价于 $\mathcal{T}$ 是线性空间 V_1 到 V_2 的同构映射，再由线性空间的同构定理可知 $\dim V_1=\dim V_2$. 这好像又绕回到"万物之本"了.

2.4.3 线性变换的矩阵表示

由上一小节可知，对线性空间 V 上的可逆线性变换 $\mathcal{T}$ 而言，显然存在逆变换 $\mathcal{T}^{-1}$，使得 $\mathcal{T}\mathcal{T}^{-1}=\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}=\mathcal{I}$，这与矩阵及其逆矩阵极其相似. 事实上，在旋转变换、反射变换和投影变换中，都分别活跃着 Givens 矩阵、Householder 矩阵和投影矩阵的身影. 这自然诱使我们将具体的矩阵与抽象的线性映射联系起来，从而将线性映射的运算转化为矩阵的数值计算. 这中间的桥梁，显然就是与坐标轴类似的线性空间的基.

设 $\mathcal{T}$ 是 n 维线性空间 V_1 到 m 维线性空间 V_2 的线性映射，$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是 V_1 的一组基，$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m$ 是 V_2 的一组基. 显然，像 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)$ 都可由 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m$ 表示出来，故可设(注意系数的下标)

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i)=a_{1i}\boldsymbol{\beta}_1+a_{2i}\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+a_{mi}\boldsymbol{\beta}_m\quad(i=1,2,\cdots,n)\tag{2.4.8}$$

若令 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n))$，则上式可**形式地**记为

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m)\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}&a_{22}&\cdots&a_{2n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\a_{m1}&a_{m2}&\cdots&a_{mn}\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m)\boldsymbol{A}\tag{2.4.9}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{m\times n}$ 称为线性映射 $\mathcal{T}$ 在 V_1 的基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 和 V_2 的基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m$ 下的**矩阵(表示)**. 此时，对 V_1 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\alpha}_1+x_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{\alpha}_n$ 和其在 V_2 中的像 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=y_1\boldsymbol{\beta}_1+y_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+y_m\boldsymbol{\beta}_m$，记坐标向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_m)^{\mathrm{T}}$，显然

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) &= \mathcal{T}(x_1\boldsymbol{\alpha}_1+x_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{\alpha}_n)=x_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+x_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+x_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n)\\ &= (\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n))\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m)\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

考虑到还有 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m)\boldsymbol{y}$，由坐标向量的唯一性，即得坐标变换公式

$$y = Ax \tag{2.4.10}$$

显然,式(2.4.9)构造了 $L(V_1,V_2)$ 到 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的一个映射 $\mathcal{A}:\mathcal{T}\mapsto\mathcal{A}$,而且矩阵 $\mathcal{A}$ 由线性映射 $\mathcal{T}$ 唯一确定. 事实上,可以证明 $\mathcal{A}$ 是 $L(V_1,V_2)$ 到 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的同构映射. 因此 $\dim L(V_1,V_2)=mn$,且 $L(V_1,V_2)$ 中的每一个线性映射都可由 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 中的一个 $m\times n$ 矩阵来代表.

特别地,当 $V_1=V_2=V$ 且基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 就是基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m$ 时,式(2.4.9)特殊化为

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{A} \tag{2.4.11}$$

即 $L(V)$ 中的每一个线性变换都可用 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 中的方阵来代表,而且线性变换的和对应矩阵的和,线性变换的数乘和乘积分别对应矩阵的数乘和乘积,可逆线性变换的逆变换对应可逆矩阵的逆矩阵. 一言以蔽之,**矩阵即变换**。

实际上,早在初学线性代数时,矩阵就已与变换水乳交融了. 最典型的莫过于本书一开始就指出的"初等矩阵与初等变换之间的关系",即定理 1.1.1.

用矩阵与变换也可以赋予行列式几何意义. 以二阶矩阵 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}$ 为例,将之看成以 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 为邻边的平行四边形,其面积函数记为 $S(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$ 或 $S(\boldsymbol{A})$. 显然 $S(\boldsymbol{I})=1$. 从几何上易证 $S(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$ 的下列性质:

(1)列交换性,即 $S(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=S(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)$;

(2)列可加性,即 $S(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=S(\boldsymbol{\alpha}_1+c\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)$;

(3)列数乘性,即 $S(c\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=|c|S(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$.

若 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 线性相关,显然 $S(\boldsymbol{A})=0=|\det(\boldsymbol{A})|$;若 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 线性无关,设 $a_{11}\neq 0$(否则交换 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}_2$),则

$$\begin{aligned} S(\boldsymbol{A}) &= S\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}=S\begin{pmatrix} a_{11} & 0\\ a_{21} & a_{22}-\dfrac{a_{12}}{a_{11}}a_{21}\end{pmatrix}=S\begin{pmatrix} a_{11} & 0\\ 0 & a_{22}-\dfrac{a_{12}}{a_{11}}a_{21}\end{pmatrix}\\ &= |a_{11}|\left|a_{22}-\frac{a_{12}}{a_{11}}a_{21}\right|S\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\\ &= |a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}|S(\boldsymbol{I})=|\det(\boldsymbol{A})| \end{aligned}$$

用初等变换来解释,则分别有

$$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)=\boldsymbol{C}_{12}\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}=(\boldsymbol{\alpha}_1+c\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)=\boldsymbol{C}_{21}(c)\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}=(c\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=\boldsymbol{C}_1(c)\boldsymbol{A}$$

注意到 $\det\boldsymbol{C}_{12}=-1$, $\det\boldsymbol{C}_{21}(c)=1$, $\det\boldsymbol{C}_1(c)=c$,因此由柯西定理,分别可得

$$|\det\boldsymbol{B}| = |\det \boldsymbol{C}_{12}|\,|\det\boldsymbol{A}| = |\det\boldsymbol{A}|$$
$$|\det\boldsymbol{B}| = |\det\boldsymbol{A}|\,|\det\boldsymbol{B}| = |c|\,|\det\boldsymbol{A}|$$

这显然就是上述三条性质. 因此,二阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式 $\det\boldsymbol{A}$ 就是相应平行四边形的"有向"面积.

上述解释可自然地推广到 3 阶(平行六面体的有向体积)乃至 n 阶方阵(单纯形的有向体积),有兴趣的读者可对此进行深入研究.

再比如,为什么"负负得正"? 为什么 $i^2=-1$? 在 2.1.3 小节中,韦塞尔已经给出了解答. 现在我们用矩阵与变换的关系,能给予详细解释.

在 $\mathbb{R}^2$ 中,记 $\boldsymbol{e}=(1,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{i}=(0,1)^{\mathrm{T}}$, 显然当 $\theta=\pi/2$ 时,有

$$\boldsymbol{G}\left(\frac{\pi}{2}\right)\boldsymbol{e}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\boldsymbol{i}$$

若记 $\boldsymbol{G}(\pi/2)=\boldsymbol{G}$, 即为 $\boldsymbol{Ge}=\boldsymbol{i}$, 用变换来解释,就是将向量 $\boldsymbol{e}$ 逆时针旋转 $\pi/2$, 就能得到向量 $\boldsymbol{i}$. 从而矩阵运算与旋转变换相吻合. 显然,如果再将向量 $\boldsymbol{i}$ 逆时针旋转 $\pi/2$, 就得到了向量 $-\boldsymbol{e}$, 而计算可知 $\boldsymbol{Gi}=-\boldsymbol{e}$, 两者亦吻合. 这也说明连续两次逆时针旋转 $\pi/2$, 向量 $\boldsymbol{e}$ 就变成了向量 $-\boldsymbol{e}$, 即 $\boldsymbol{G}^2\boldsymbol{e}=\boldsymbol{G}(\boldsymbol{Ge})=\boldsymbol{Gi}=-\boldsymbol{e}$. 进一步地,由于 $\boldsymbol{G}^2(\pi/2)=\boldsymbol{G}(\pi)$, 故 $\boldsymbol{G}(\pi)\boldsymbol{e}=-\boldsymbol{e}$, 这说明将向量 $\boldsymbol{e}$ 逆时针旋转 π, 就得到了向量 $-\boldsymbol{e}$.

现在退化到一维的情形. 此时 $\boldsymbol{e}$ 对应 1, $\boldsymbol{i}$ 对应 i, 因此 $\boldsymbol{Ge}=\boldsymbol{i}$ 对应 $i\cdot 1=i$, 即 $\boldsymbol{G}$ 对应 i, 从而 $\boldsymbol{G}^2$ 对应 i^2, $\boldsymbol{G}^2\boldsymbol{e}=-\boldsymbol{e}$ 对应 $i^2\cdot 1=-1$, 此即 $i^2=-1$.

由于 $\boldsymbol{G}(\pi)(-\boldsymbol{e})=\boldsymbol{e}$, 即 $\boldsymbol{G}^2(-\boldsymbol{e})=\boldsymbol{e}$, 这显然对应着 $i^2\cdot(-1)=1$, 也就是 $(-1)\cdot(-1)=1$, 至此,我们就不难理解"以毒攻毒"的"负负得正"法则了.

思考: 如何解释 $(-1)\cdot(+1)=-1$, $(+1)\cdot(-1)=-1$ 以及 $i\cdot 2=2i$ 呢?

按照线性变换与矩阵的对应关系,借助于线性变换的矩阵表示,式样繁多的线性变换问题,借助于适当的基和坐标,可转化为统一的矩阵和向量运算问题. 我们也不用再关心这些线性变换的具体形式和内容,从而抹去了它们各自的个性. 反过来,矩阵向量积乃至于矩阵乘法,也可看成线性变换. 这就能使我们以一种"一览众山小"的视角,来看待具体而繁杂的矩阵运算,从而更逼近问题的本质. 从这个意义上讲,线性变换反而体现了一种动态的、直观、几何的手段.

说到变换,我们再说个小笑话. 汤教授某日因事不能去上课,事先在教室里贴出如下通知:"Professor Tang will be unable to meet his classes today."一学生顽劣,上前将"classes"之"c"擦去,众阅之,哄堂大笑. 讵料教授责任心强,办完事后就匆忙赶回. 看到学生的恶作剧,他并未勃然大怒,而是略加思索,然后又把"lasses"的首字母擦去. 众阅之,皆大呼小叫,恍若驴鸣.

思考: 上面无非把一个单词变换成了另一个单词,但这种变换是线性变换吗?

例 2.4.12 **(旋转变换的逆变换)** 将 $\mathbb{R}^2$ 中的任意向量 $\overrightarrow{OP}=(\xi_1,\xi_2)$ 绕原点顺时针旋转角 θ 至 $\overrightarrow{OP'}=(\eta_1,\eta_2)$, 易知像 (η_1,η_2) 与原像 (ξ_1,ξ_2) 之间的关系为

$$\begin{pmatrix}\eta_1\\ \eta_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{G}'(\theta)\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix}$$

显然,此线性变换就是例 2.4.1 中的旋转变换的逆变换,并且其矩阵 $\boldsymbol{G}'(\theta)$ 也是 Givens 矩阵 $\boldsymbol{G}(\theta)$ 的逆矩阵.

例 2.4.13　$\mathbb{R}^3$ 中的投影变换 $\mathcal{P}:(x,y,z)\to(x,y,0)$ 在基 $\boldsymbol{e}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{e}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{e}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$ 下的矩阵为

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

思考:如何用基 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3$ 来表示矩阵 $\boldsymbol{P}$?

例 2.4.14　考察 $\mathbb{P}[x]_n$ 中的微分变换 $\mathcal{D}(f)=f',f\in\mathbb{P}[x]_n$, 由于标准基 $1,x,x^2,\cdots,x^{n-1}$ 在 $\mathcal{D}$ 下的像分别为

$\mathcal{D}(1)=0=0\cdot1+0\cdot x+0\cdot x^2+\cdots+0\cdot x^{n-2}+0\cdot x^{n-1}$

$\mathcal{D}(x)=1=1\cdot1+0\cdot x+0\cdot x^2+\cdots+0\cdot x^{n-2}+0\cdot x^{n-1}$

$\mathcal{D}(x^2)=2x=0\cdot1+2\cdot x+0\cdot x^2+\cdots+0\cdot x^{n-2}+0\cdot x^{n-1}$

……

$\mathcal{D}(x^{n-1})=(n-1)x^{n-2}=0\cdot1+0\cdot x+\cdots+0\cdot x^{n-3}+(n-1)\cdot x^{n-2}+0\cdot x^{n-1}$

因此,$\mathcal{D}$ 在标准基 $1,x,x^2,\cdots,x^{n-1}$ 下的矩阵为

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1&0&\cdots&0\\0&0&2&\ddots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\0&0&0&\ddots&n-1\\0&0&0&\cdots&0\end{pmatrix}$$

例 2.4.15　在矩阵空间 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 中,对任意 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{2\times2}$,定义线性变换:

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{XB},\ \boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}$$

求$\mathcal{T}$在 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的标准基下的矩阵.

解: $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的标准基为 $\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22}$, 并且

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(\boldsymbol{E}_{11})&=\boldsymbol{E}_{11}\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&1\\0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{E}_{11}+\boldsymbol{E}_{12}\\&=1\cdot\boldsymbol{E}_{11}+1\cdot\boldsymbol{E}_{12}+0\cdot\boldsymbol{E}_{21}+0\cdot\boldsymbol{E}_{22}\end{aligned}$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{E}_{12})=\boldsymbol{E}_{12}\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&-1\\0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{E}_{11}-\boldsymbol{E}_{12}=1\cdot\boldsymbol{E}_{11}+(-1)\cdot\boldsymbol{E}_{12}+0\cdot\boldsymbol{E}_{21}+0\cdot E_{22}$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{E}_{21})=\boldsymbol{E}_{21}\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}0&0\\1&1\end{pmatrix}=\boldsymbol{E}_{21}+\boldsymbol{E}_{22}=0\cdot\boldsymbol{E}_{11}+0\cdot\boldsymbol{E}_{12}+1\cdot\boldsymbol{E}_{21}+1\cdot\boldsymbol{E}_{22}$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{E}_{22})=\boldsymbol{E}_{22}\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}0&0\\1&-1\end{pmatrix}=\boldsymbol{E}_{21}-\boldsymbol{E}_{22}=0\cdot\boldsymbol{E}_{11}+0\cdot\boldsymbol{E}_{12}+1\cdot\boldsymbol{E}_{21}+(-1)\cdot\boldsymbol{E}_{22}$$

所以$\mathcal{T}$在 $\mathbb{R}^{2\times 2}$的标准基下的矩阵为$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{B} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 1 & 0 & 0\\ 1 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 1 & -1\end{pmatrix}$.

例 2.4.16 对任意 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{SR}^{2\times 2}$，定义线性映射$\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{PX}+\boldsymbol{XP}$，其中 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$. 试求矩阵 $\boldsymbol{X}$，使得 $\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\begin{pmatrix}2 & 4\\ 0 & 0\end{pmatrix}$.

解:设所求为 $\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}a & b\\ b & c\end{pmatrix}$，则 $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{PX}+\boldsymbol{XP}=\begin{pmatrix}2a & -a+b-c\\ a+b+c & 0\end{pmatrix}$，又因为$\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\begin{pmatrix}2 & 4\\ 0 & 0\end{pmatrix}$，所以 $2a=2$，$-a+b-c=4$，$a+b+c=0$，解得 $a=1$，$b=2$，$c=-3$，从而所求为 $\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & -3\end{pmatrix}$.

当基改变后，线性变换的矩阵是否也改变呢？

设$\mathcal{T}$为 n 维向量空间 V 上的线性变换，$\mathcal{T}$在 V 的基$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 和$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 下的矩阵分别是 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，并且基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}$，则

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{A}$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{PB}$$

又因为

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)&=\mathcal{T}((\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P})=\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P}\quad\text{(为什么?)}\\&=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{AP}\end{aligned}$$

因此 $\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{PB}$，即 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}$.

定义 2.4.4 对 n 阶矩阵$\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{B}$，如果存在 n 阶可逆矩阵(即满秩矩阵) $\boldsymbol{P}$，使得

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{B}\tag{2.4.12}$$

则称 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 相似(similar)，或 $\boldsymbol{A}$ 相似于 $\boldsymbol{B}$，，记为 $\boldsymbol{A}\simeq\boldsymbol{B}$，称

$$\boldsymbol{S}_P:\boldsymbol{A}\mapsto\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}\tag{2.4.13}$$

为**相似变换**(similarity transformation)，并称 $\boldsymbol{P}$ 是**相似矩阵**(similarity martrix).

定理 2.4.4 同一个线性变换在不同基下的矩阵是相似的；反之，相似的两个矩阵可看成同一个线性变换在不同基下的矩阵.

若将线性空间 V 中的线性变换$\mathcal{T}$在基(I)和基(II)下的矩阵记为${}_{\mathrm{II}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}$，则式即为

$$[\mathcal{T}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{II}}={}_{\mathrm{II}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{I}}\tag{2.4.14}$$

其中，$[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{I}}$ 表示 $\boldsymbol{x}$ 在基(I)下的坐标向量，$[\mathcal{T}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{II}}$表示 $\boldsymbol{x}$ 的像 $\boldsymbol{y}=\mathcal{T}(\boldsymbol{x})$在基(II)下的坐标向量. 特别地，当基(I)与基(II)完全相同时，相应的${}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}$ 就称为$\mathcal{T}$在基(I)下的矩阵，此时式变成了

$$[\mathcal{T}(\boldsymbol{x})_{\mathrm{I}}={}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{I}}\tag{2.4.15}$$

于是

$$
\begin{aligned}
{}_{\mathrm{II}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{II}}\,{}_{\mathrm{II}}[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{II}} &= [\mathcal{T}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{II}}\text{（对基(II)使用式(2.4.15)）}\\
&= [\mathcal{I}(\mathcal{T}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{II}} = {}_{\mathrm{II}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{I}}\text{（对}\mathcal{I}\text{使用式(2.4.14)）}\\
&= {}_{\mathrm{II}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{I}}\text{（式(2.4.15)）}\\
&= {}_{\mathrm{II}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}[\mathcal{I}(\boldsymbol{x})]_{\mathrm{I}}\\
&= {}_{\mathrm{II}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{II}}[\boldsymbol{x}]_{\mathrm{II}}\quad\text{（对}\mathcal{I}\text{从基(II)到基(I)使用式(2.4.14)）}
\end{aligned}
$$

由 $\boldsymbol{x}$ 的任意性，即得 ${}_{\mathrm{II}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{II}} = {}_{\mathrm{II}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{T}]_{\mathrm{I}}\,{}_{\mathrm{I}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{II}}$. 这显然就是式(2.4.12)，其中，${}_{\mathrm{I}}[\mathcal{I}]_{\mathrm{II}}$ 就是相似矩阵 $\boldsymbol{P}$，也就是基(I)到基(II)的过渡矩阵.

例 2.4.17　考虑 $\mathbb{R}^2$ 中关于 x 轴的反射变换 $\mathcal{H}$，显然 $\mathcal{H}$ 在标准基(I)：$\boldsymbol{e}_1=(1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{e}_2=(1,0)^{\mathrm{T}}$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{H}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$. 对于 $\mathbb{R}^2$ 中的另一组基(II)：$\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(1,-1)^{\mathrm{T}}$，易知(I)到(II)的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&-1\\1&1\end{pmatrix}$，因此 $\mathcal{H}$ 在基(II)下的矩阵为 $\boldsymbol{H}'=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{HP}=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$. 事实上，由于 $\mathcal{H}(\boldsymbol{\alpha}_1)=(1,-1)^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{\alpha}_2$，$\mathcal{H}(\boldsymbol{\alpha}_2)=(-1,-1)^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{\alpha}_1$，确实有 $(\mathcal{H}(\boldsymbol{\alpha}_1),\mathcal{H}(\boldsymbol{\alpha}_2))=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{H}'$. 从矩阵表示看，矩阵 $\boldsymbol{H}$ 比矩阵 $\boldsymbol{H}'$ 更特殊些(更接近单位矩阵)，这说明标准基(I)比基(II)更好.

例 2.4.18　对多项式空间 $\mathbb{P}[t]_3$ 中的任意多项式 $f(t)=x_1+x_2t+x_3t^2$，定义线性变换

$$\mathcal{T}(f(t))=(x_2+x_3)+(x_3+x_1)t+(x_1+x_2)t^2$$

试求 $\mathbb{P}[t]_3$ 的一组基，使 $\mathcal{T}$ 在该基下的矩阵为对角矩阵.

解：由于

$\mathcal{T}(1)=\mathcal{T}(1+0t+0t^2)=(0+0)+(0+1)t+(1+0)t^2=0\cdot1+1\cdot t+1\cdot t^2$

$\mathcal{T}(t)=(1+0)+(0+0)t+(0+1)t^2=1\cdot1+0\cdot t+1\cdot t^2$

$\mathcal{T}(t^2)=(0+1)+(1+0)t+(0+0)t^2=1\cdot1+1\cdot t+0\cdot t^2$

所以线性变换 $\mathcal{T}$ 在标准基 $1,t,t^2$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{pmatrix}$.

设所求基为 $f_1(t),f_2(t),f_3(t)$，则 $\mathcal{T}$ 在其下的矩阵为对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$. 由于同一线性变换在不同基下的矩阵相似，因此有 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{\Lambda}$，这里 $\boldsymbol{P}$ 是过渡矩阵，即 $(f_1(t),f_2(t),f_3(t))=(1,t,t^2)\boldsymbol{P}$. 这样问题就转化为求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量.

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}| &= \begin{vmatrix}-\lambda&1&1\\1&-\lambda&1\\1&1&-\lambda\end{vmatrix} = (2-\lambda)\begin{vmatrix}1&1&1\\1&-\lambda&1\\1&1&-\lambda\end{vmatrix}\\
&= (2-\lambda)\begin{vmatrix}1&1&1\\0&-\lambda-1&0\\0&0&-\lambda-1\end{vmatrix} = (2-\lambda)(\lambda+1)^2
\end{aligned}
$$

解得特征值为 $\lambda_1 = 2$ 和 $\lambda_{2,3} = -1$（二重）.

当 $\lambda_1 = 2$ 时，$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}) = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$，解得特征向量 $\boldsymbol{p}_1 = (1,1,1)^{\mathrm{T}}$.

当 $\lambda_{2,3} = -1$ 时，$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$，解得特征向量 $\boldsymbol{p}_2 = (1,-1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{p}_3 = (1,0,-1)^{\mathrm{T}}$. 因此 $\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_3) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$，从而所求基为

$$f_1(t) = (1,t,t^2)\,p_1 = 1+t+t^2$$
$$f_2(t) = (1,t,t^2)\,p_2 = 1-t$$
$$f_3(t) = (1,t,t^2)\,p_3 = 1-t^2$$

本题中，虽然标准基比 $f_1(t),f_2(t),f_3(t)$ 形式更简单，但后者的矩阵表示是最简单的对角矩阵，可见，标准基未必一定是最好的基底.

Matlab 中提供了内置函数 eig 用于计算矩阵的特征值和特征向量，调用格式为

```
[V,D] = eig(A)
```

请注意，返回的相似矩阵 **V** 是正交矩阵，而对角矩阵 **D** 则以对应特征值为对角元.

既然谈到特征值，那就让我们从变换角度来考察一下它.

定义 2.4.5　设 $\mathcal{T}$ 是在数域 $\mathbb{F}$ 上线性空间 V 的一个线性变换，如果存在 $\lambda \in \mathbb{F}$ 及非零向量 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，使得

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) = \lambda\boldsymbol{\alpha} \tag{2.4.16}$$

则称 λ 为 $\mathcal{T}$ 的**特征值**(eigenvalue)，称非零向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 为 $\mathcal{T}$ 的属于特征值 λ 的**特征向量**(eigenvector)，并称 $(\lambda,\boldsymbol{\alpha})$ 为 $\mathcal{T}$ 的**特征对**(eigenpair). 满足式(2.4.16)的所有向量的集合 V_λ，即 $\mathcal{T}$ 属于特征值 λ 的全部特征向量再加上零向量 $\boldsymbol{\theta}$，显然是 V 的一个子空间，称为 $\mathcal{T}$ 的属于特征值 λ 的**特征子空间**(eigensubspace).

显然，特征向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 经过 $\mathcal{T}$ 变换以后，仍然与 $\boldsymbol{\alpha}$ 成倍数关系（倍数就是特征值 λ），即线性相关或"共线". 例如，在例 2.4.18 中，易知有 $\mathcal{T}(f_1) = 2f_1$，$\mathcal{T}(f_2) = -f_2$，$\mathcal{T}(f_3) = -f_3$，即多项式 f_1,f_2,f_3 分别是特征值 $2,-1,-1$ 的特征向量，它们经过 $\mathcal{T}$ 变换后的像（多项式）仅仅是原像 f_1,f_2,f_3 的常数倍，即像仍在相应的特征子空间中. 再比如对 $\mathbb{C}^\infty(-\infty,+\infty)$ 上的微分变换 $\mathcal{D}$，显然，对任意实数 λ，都有 $\mathcal{D}(e^{\lambda x}) = \lambda e^{\lambda x}$，因此函数 $y = e^{\lambda x}$ 是 $\mathcal{D}$ 的属于特征值 λ 的特征向量. 要特别注意的是，线性变换 $\mathcal{T}$ 的"特征向量"未必局限于 $\mathbb{C}^n$ 中，因此以后的学科中会重新命名为"特征函数"等更具体的名称. 另外，这里的

线性变换 $\mathcal{T}$ 就是例 2.4.7 中提到的数乘变换 $\mathcal{K}$.

定义 2.4.6　对矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，如果存在 $\lambda,\mu \in \mathbb{C}$ 及非零向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$，使得

$$\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \mu \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \tag{2.4.17}$$

则称 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的(右)**特征值**，非零向量 $\boldsymbol{x}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 λ 的(**右**)**特征向量**，$(\lambda,\boldsymbol{x})$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的(**右**)**特征对**，满足式 (2.4.17) 的所有向量 $\boldsymbol{x}$ 的集合 V_λ，称为 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 λ 的(**右**)**特征子空间**. 类似地，称 μ 为 $\boldsymbol{A}$ 的**左特征值**(left eigenvalue)，非零向量 $\boldsymbol{y}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 μ 的**左特征向量**(left eigenvector)，$(\mu,\boldsymbol{y})$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的**左特征对**(left eigenpair)，满足式 (2.4.17) 的所有向量 $\boldsymbol{y}$ 的集合 V_μ，称为 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 μ 的**左特征子空间**(left eigensubspace). 另外，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值的集合称为 $\boldsymbol{A}$ 的**谱**(spectrum)，记为 $\sigma(\boldsymbol{A})$，$\boldsymbol{A}$ 的特征值的模的最大值称为 $\boldsymbol{A}$ 的**谱半径**(spectral radius)，记为 $\rho(\boldsymbol{A})$.

变换即矩阵. 设 $\mathcal{T}$ 在线性空间 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{T}$ 的特征值就是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值. 事实上，设 $\boldsymbol{\alpha}$ 在此基下的坐标向量为 x（显然 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$），则

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathcal{T}((\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)x) = \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)x = (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{Ax}$$

再由式 (2.4.16) 可知 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) = \lambda\boldsymbol{\alpha} = \lambda(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)(\lambda\boldsymbol{x})$，故 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{x}$.

例 2.4.19　对于 Sylvester 方程 $\boldsymbol{AX} - \boldsymbol{XB} = \boldsymbol{C}$，其中 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. 定义 Sylvester 变换

$$\boldsymbol{S}:\ \boldsymbol{X} \mapsto \boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{AX} - \boldsymbol{XB}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 有公共特征值，那么变换 $\boldsymbol{S}$ 是不可逆的.

证明：设 $(\lambda,\boldsymbol{x})$、$(\mu,\boldsymbol{y})$ 分别为矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 的右、左特征对，即有 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B} = \mu\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}) &= \boldsymbol{A}(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}) - (\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{Ax})\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}) \\ &= \lambda(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}) - \mu(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}) = (\lambda-\mu)\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}}.\end{aligned}$$

如果存在某对 λ、μ 满足 $\lambda = \mu$，则存在非零矩阵 $\boldsymbol{xy}^{\mathrm{T}} \in \ker(\boldsymbol{S})$，即 $\dim\ker(\boldsymbol{S}) \neq 0$，故

$$\dim \mathrm{Im}(\boldsymbol{S}) = n - \dim\ker(\boldsymbol{S}) < n$$

从而变换 $\boldsymbol{S}$ 不可逆.

此例说明，变换 $\boldsymbol{S}$ 可逆的必要条件是矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 没有公共特征值. 在例 4.1.4 中，我们将证明，这个条件也是充分的. 而 $\boldsymbol{S}$ 可逆意味着像 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{C}$ 对应唯一的原像 $\boldsymbol{X}$，即 Sylvester 方程有唯一解. 因此 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 没有公共特征值也是 Sylvester 矩阵方程有唯一解的充要条件.

2.4.4　线性变换的不变子空间

线性变换 $\mathcal{T}$ 的特征子空间 V_λ 是一种特殊的子空间，因为它的像 $\mathcal{T}(V_\lambda)$ 仍在 V_λ 中. 这样的子空间就是所谓的“不变子空间”.

定义 2.4.7　设 $\mathcal{T}$ 是数域 $\mathbb{F}$ 上线性空间 V 的线性变换，W 是 V 的子空间. 如果对任意向量 $\boldsymbol{\alpha} \in W$ 都有 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) \in W$，则称 W 是 $\mathcal{T}$ 的**不变子空间**(invariant subspace)，并

称$\mathcal{T}$在 W 上的部分即 $\mathcal{T}_W: W \mapsto W$ 为$\mathcal{T}$在 W 上的**限制**(restriction),即 $\mathcal{T}_W(\boldsymbol{\alpha}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}), \boldsymbol{\alpha} \in W$.

例如,$\mathcal{T}$在 $\ker \mathcal{T}$上的作用就是零变换$\mathcal{O}$,而在 V_λ 中则是数乘变换$\mathcal{K}$. 要注意的是,对于 V 中不属于 W 的向量$\boldsymbol{\eta}$,$\mathcal{T}_W(\boldsymbol{\eta})$ 是没有意义的.

例 2.4.20　线性空间 V 和零空间 $\{\boldsymbol{\theta}\}$ 都是 V 上的线性变换$\mathcal{T}$ 的不变子空间. 我们称 V 和 $\{\boldsymbol{\theta}\}$ 为线性变换$\mathcal{T}$ 的**平凡不变子空间**.

例 2.4.21　线性空间 V 上的线性变换$\mathcal{T}$ 的核空间 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 和像空间 $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 都是$\mathcal{T}$ 的不变子空间.

进一步地,可以证明,线性变换$\mathcal{T}$ 的不变子空间的交与和仍然是$\mathcal{T}$ 的不变子空间.

有非平凡不变子空间的线性变换,其矩阵表示是否有什么特殊形式呢?

设 W 是 V 的一个 m 维非平凡不变子空间,并且 $\dim W = m$,则 $0 < m < n$. 将 W 中的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_m$ 扩充成 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_m, \boldsymbol{\alpha}_{m+1}, \boldsymbol{\alpha}_{m+2}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$,因为 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j) \in W\ (j = 1, 2, \cdots, m)$,则

$$\begin{cases} \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1) = a_{11}\boldsymbol{\alpha}_1 + a_{12}\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + a_{m1}\boldsymbol{\alpha}_m \\ \cdots\cdots \\ \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_m) = a_{1m}\boldsymbol{\alpha}_1 + a_{2m}\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + a_{mm}\boldsymbol{\alpha}_m \\ \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_{m+1}) = a_{1,m+1}\boldsymbol{\alpha}_1 + a_{2,m+1}\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + a_{m,m+1}\boldsymbol{\alpha}_m + a_{m+1,m+1}\boldsymbol{\alpha}_{m+1} + \cdots + a_{n,m+1}\boldsymbol{\alpha}_n \\ \cdots\cdots \\ \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n) = a_{1n}\boldsymbol{\alpha}_1 + a_{2n}\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + a_{mn}\boldsymbol{\alpha}_m + a_{m+1,n}\boldsymbol{\alpha}_{m+1} + \cdots + a_{n,n}\boldsymbol{\alpha}_n \end{cases}$$

也就是 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix}$,这里

$$\boldsymbol{A}_{11} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix}, \boldsymbol{A}_{12} = \begin{pmatrix} a_{1,m+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,m+1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \boldsymbol{A}_{22} = \begin{pmatrix} a_{m+1,m+1} & \cdots & a_{m+1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,m+1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

定理 2.4.5　线性空间 V 上的线性变换$\mathcal{T}$有非平凡的不变子空间的充要条件是$\mathcal{T}$在 V 的一组基下的矩阵为块上三角矩阵,即形如 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix}$ 的矩阵.

证明:必要性已如前述,下证充分性.

设 $\boldsymbol{T}$ 在 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的矩阵为块上三角矩阵 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix}$,$\boldsymbol{A}_{11} \in \mathbb{F}^{m \times m}$ $(0 < m < n)$. 由 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{A}$ 可知

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j) = a_{1j}\boldsymbol{\alpha}_1 + a_{2j}\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + a_{mj}\boldsymbol{\alpha}_m \quad (j = 1, 2, \cdots, m)$$

令 $W = \mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_m)$,则 W 是 V 的一个 m 维子空间,并且 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j) \in W$,

$j=1,2,\cdots,m$. 因此对 W 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\alpha}_1+\cdots+x_m\boldsymbol{\alpha}_m\in W$，有 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=x_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+\cdots+x_m\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_m)\in W$. 根据定义，并注意到 $0<m<n$，所以 W 是 V 的非平凡不变子空间. 证毕.

面对上述结果，我们自然会追问：在什么条件下矩阵 $\boldsymbol{A}_{12}$ 会特殊化为零矩阵？

定理 2.4.6　线性空间 V 上的线性变换 T 在 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(1)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_1}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_1^{(s)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(s)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_s}^{(s)}$ 下的矩阵为块对角矩阵 $\mathrm{diag}\{\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_s\}$ 的充要条件是 V 可以分解为 T 的不变子空间的直和，即

$$V=W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_s$$

这里，k_i 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_i$（$k_1+k_2+\cdots+k_s=n$）为限制 $\mathcal{T}|_{W_i}$ 在相应基 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)}$ 下的矩阵，$i=1,2,\cdots,s$.

证明：必要性. 设 $\mathcal{T}$ 在 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(1)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_1}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_1^{(s)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(s)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_s}^{(s)}$ 下的矩阵表示为块对角矩阵 $\mathrm{diag}\{\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_s\}$. 令 $W_i=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)})$，$i=1,2,\cdots,s$，则

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)})=(\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)})\boldsymbol{A}_i$$

因此 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j^{(i)})\in W_i$，$j=1,2,\cdots,k_i$，从而 W_i 是 $\mathcal{T}$ 的不变子空间，并且

$$V=W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_s$$

充分性. 设 V 可以分解为 $\mathcal{T}$ 的非平凡不变子空间的直和，即 $V=W_1\oplus W_2\oplus\cdots\oplus W_s$. 在 W_i 中取一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)}$，则由定理 2.3.9 可知 $\boldsymbol{\alpha}_1^{(1)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_1}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_1^{(s)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(s)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_s}^{(s)}$ 为 V 的一组基. 因为 W_i 是 $\mathcal{T}$ 的不变子空间，所以 $T(\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)})=(\boldsymbol{\alpha}_1^{(i)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(i)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_i}^{(i)})\boldsymbol{A}_i$，于是

$$\begin{aligned}&\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1^{(1)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_1}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_1^{(s)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(s)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_s}^{(s)})\\&=(\boldsymbol{\alpha}_1^{(1)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_1}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_1^{(s)},\boldsymbol{\alpha}_2^{(s)},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{k_s}^{(s)})\,\mathrm{diag}\{\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_s\}\end{aligned}$$

证毕.

根据定理 2.4.6，V 的基是由各非平凡不变子空间 W_i 的基合并而成的. 考虑到 $\mathcal{T}$ 的特征子空间也是不变子空间，因此上述 $\boldsymbol{A}_i$ 可取为 $\mathcal{T}$ 的特征子空间. 特别地，我们有如下推论：

推论：n 维线性空间 V 上的线性变换 $\mathcal{T}$ 在 V 的某组基下的矩阵为对角矩阵 $\mathrm{diag}\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$ 的充要条件是 V 可以分解为 $\mathcal{T}$ 的 n 个一维特征子空间的直和 $V=V_{\lambda_1}\oplus V_{\lambda_2}\oplus\cdots\oplus V_{\lambda_n}$，这里 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 为 $\mathcal{T}$ 的非亏损特征值，即代数重数等于几何重数的特征值.

例 2.4.22　求 $\mathbb{R}^3$ 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 所对应的线性变换 $\mathcal{T}$ 的所有非平凡不变子空间，其中矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{pmatrix}$$

解:例 2.4.18 中已求得特征值 $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = \lambda_3 = -1$ 及对应的特征向量

$$\boldsymbol{p}_1 = (1,1,1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{p}_2 = (1,-1,0)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{p}_3 = (1,0,-1)^{\mathrm{T}}$$

因此 T 的所有非平凡不变子空间为 V_1. V_2，这里

$$V_1 = \{c_1\boldsymbol{p}_1\}, V_2 = \{c_2\boldsymbol{p}_2 + c_3\boldsymbol{p}_3\}, c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}$$

由定理 2.4.6 可知 $\mathbb{R}^3 = V_1 \oplus V_2$.

特别地,特征值 -1 的代数重数等于几何重数,因此 -1 是非亏损特征值. 若令

$$V_{21} = \{k_1\boldsymbol{p}_2\}, V_{22} = \{k_2\boldsymbol{p}_3\}$$

则成立 $V_2 = V_{21} \oplus V_{22}$ 以及 $\mathbb{R}^3 = V_1 \oplus V_{21} \oplus V_{22}$.

2.5 矩阵的 Jordan 标准型

从逻辑上看,标准型的理论源自矩阵的相似性,因为相似矩阵有许多相似不变量:特征多项式、特征值(包括代数重数和几何重数)、行列式、迹及秩等,并且特征向量也可以借助于可逆的相似变换矩阵互相求出. 这自然导出了寻找相似矩阵集合中的"代表矩阵"的问题. "代表矩阵"当然越简单越好. 对于可对角化矩阵,"代表矩阵"就是特征值组成的对角矩阵. 但是令人非常遗憾的是:**一般矩阵未必与对角矩阵相似!** 因此我们只能"退而求其次",寻找"**几乎对角的**"矩阵. 这就引出了矩阵在相似变换下的各种标准型问题,其中 Jordan 标准型是最接近对角的矩阵,因为除了对角元之外,它只在第 1 条对角线上另取 1 或 0. 弄清楚了矩阵相似的本质,理论上、计算上以及应用上的许多问题就容易处理了,当然复杂度也大了.

2.5.1 从算术基本定理到 Jordan 标准型

我们知道,360 的素因子有 2,3,5,并且 $360 = 2^3 \times 3^2 \times 5$. 一般地,对于整数 n, 我们有算术基本定理: $n = \pm p_1^{m_1} \times p_2^{m_2} \times \cdots \times p_s^{m_s}$. 对于多项式,高斯在博士论文中证明了代数基本定理,即任何复系数一元 n 次多项式 $f(z)$ 在复数域内有且只有 n 个根(重根按重数计算),也就是

$$f(z) = \sum_{k=0}^{n} a_k z^k = (z - z_1)^{m_1}(z - z_2)^{m_2}\cdots(z - z_s)^{m_s} \quad (m_1 + m_2 + \cdots + m_s = n)$$

定理 2.5.1 设 V 是复数域 $\mathbb{C}$ 上的线性空间,$\mathcal{T}$是 V 上的线性变换. 令$\mathcal{T}$在 V 的一组基下的矩阵表示为$\boldsymbol{A}$, 如果 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $\varphi(\lambda) = |\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}|$ 可分解因式为

$$\varphi(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)^{m_1}(\lambda - \lambda_2)^{m_2}\cdots(\lambda - \lambda_s)^{m_s} \quad (m_1 + m_2 + \cdots + m_s = n) \quad (2.5.1)$$

则 V 可分解成不变子空间的直和,即

$$V = N_1 \oplus N_2 \oplus \cdots \oplus N_s$$

这里, $N_i \equiv \mathrm{Ker}((\mathcal{T} - \lambda_i\mathcal{I})^{m_i})$.

对比定理 2.4.6 可知,这里选择的一组不变子空间是 N_i, 其中的 $(\mathcal{T} - \lambda_i\mathcal{I})^{m_i}$ 表示

的是变换 $(\mathcal{T}-\lambda_i\mathcal{I})$ 的 m_i 次幂. 我们称子空间 N_i 为**根子空间**(root subspace)或**广义特征子空间**(generalized eigensubspace).

适当选取根子空间 N_i 的基(称为 **Jordan 基**,Jordan basis),根据定理 2.4.6,每个子空间的 Jordan 基合并起来即为 V 的 Jordan 基,并且 $\mathcal{T}$ 在 V 的此 Jordan 基下的矩阵 $\boldsymbol{J}$ 为块对角阵

$$\boldsymbol{J}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{J}_1(\lambda_1),\boldsymbol{J}_2(\lambda_2),\cdots,\boldsymbol{J}_s(\lambda_s)) \tag{2.5.2}$$

其中,

$$\boldsymbol{J}_i(\lambda_i)=\begin{pmatrix}\lambda_i & 1 & & \\ & \lambda_i & \ddots & \\ & & \ddots & 1\\ & & & \lambda_i\end{pmatrix}_{m_i\times m_i}\quad (i=1,2,\cdots,s) \tag{2.5.3}$$

我们称 $\boldsymbol{J}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的 **Jordan 标准型**(Jordan canonical form 或 Jordan normal form), $\boldsymbol{J}_i(\lambda_i)$ 为 m_i 阶 **Jordan 块**(Jordan block).

要注意的是,与式 (2.5.1) 不同的是,式 (2.5.2) 中的特征值可以相等. 另外,为避免繁冗的表述,我们也将对角元为 λ 的 k 阶 Jordan 块记为 $\boldsymbol{J}_k(\lambda)$. 请读者根据上下文加以甄别.

定理 2.5.2　设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$. 如果 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $\varphi(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|$ 可分解因式为式 (2.5.1),则 $\boldsymbol{A}$ 经过相似变换可化成唯一的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}$ (不计 Jordan 块的排列次序),即存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ (称为 **Jordan 变换矩阵**,Jordan transformation matrix)使得

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{J} \tag{2.5.4}$$

即 $\boldsymbol{A}$ 有 **Jordan 分解**(Jordan decomposition)

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{J}\boldsymbol{P}^{-1} \tag{2.5.5}$$

把 $\boldsymbol{A}$ 的同一个特征值的若干个 Jordan 块依次排列成块对角矩阵,就得到 Jordan 标准型

$$\boldsymbol{J}_A\equiv\operatorname{diag}(\boldsymbol{A}_1(\lambda_1),\boldsymbol{A}_2(\lambda_2),\cdots,\boldsymbol{A}_t(\lambda_t))\quad(n_1+n_2+\cdots+n_t=n) \tag{2.5.6}$$

其中, $\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)$ 是 n_i 阶的 **Jordan 子矩阵**(Jordan submatrix),包含 k_i 个阶数分别为 n_{ij} 的 Jordan 块($n_{i1}+n_{i2}+\cdots+n_{ik_i}=n_i$),即

$$\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)\equiv\operatorname{diag}(\boldsymbol{J}_1(\lambda_i),\boldsymbol{J}_2(\lambda_i),\cdots,\boldsymbol{J}_{k_i}(\lambda_i))\quad(i=1,2,\cdots,t)$$

2.5.2　Jordan 标准型的简易求法

先介绍一种简易求法. 我们结合图 2-19 来进行分析.

在图 2-19 中, $\boldsymbol{A}_1(\lambda_1)$ 是由 3 个(即 $k_1=3$)阶数分别为 $n_{11}=1,n_{12}=2,n_{13}=5$ 的 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_1(\lambda_1),\boldsymbol{J}_2(\lambda_1),\boldsymbol{J}_3(\lambda_1)$ 构成的块对角矩阵,其阶数 $n_1=n_{11}+n_{12}+n_{13}=8$. 事实上, n_1 就是特征值 λ_1 的代数重数.

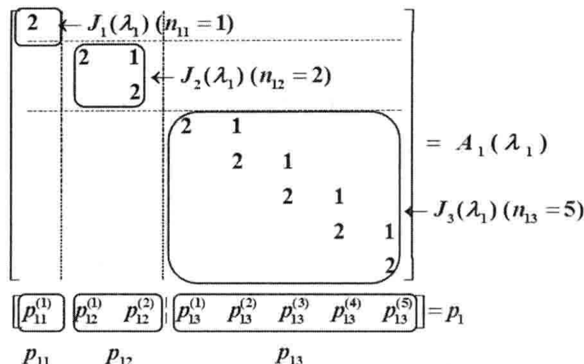


图 2-19　Jordan 子矩阵的结构示意图

根据 $\boldsymbol{J}_A$ 的结构，将 Jordan 变换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 列分块为 $\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_t)$，其中 $\boldsymbol{p}_i$ 是 $n\times n_i$ 阶的矩阵. 由 $\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{PJ}_A$，可知 $\boldsymbol{Ap}_i=\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)$.

进一步，根据 $\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)$ 的结构，将 $\boldsymbol{p}_i$ 列分块为 $\boldsymbol{p}_i=(\boldsymbol{p}_{i1},\boldsymbol{p}_{i2},\cdots,\boldsymbol{p}_{ik_i})$ 其中 $\boldsymbol{p}_{ij}$ 是 $n\times n_{ij}$ 阶的矩阵 $(j=1,2,\cdots,k_i)$. 由 $\boldsymbol{Ap}_i=\boldsymbol{p}_i\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)$，可知 $\boldsymbol{Ap}_{ij}=\boldsymbol{p}_{ij}\boldsymbol{J}_j(\lambda_i)$.

在图 2-9 中，$\boldsymbol{p}_1=(\boldsymbol{p}_{11},\boldsymbol{p}_{12},\boldsymbol{p}_{13})$ 是 $n\times 8$ 阶矩阵，其中 $\boldsymbol{p}_{11}$ 是 $n\times 1$ 阶矩阵，$\boldsymbol{p}_{12}$ 是 $n\times 2$ 阶矩阵，$\boldsymbol{p}_{13}$ 是 $n\times 5$ 阶矩阵.

最后，根据 $\boldsymbol{J}_j(\lambda_i)$ 的结构，设 $\boldsymbol{p}_{ij}=(\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)},\boldsymbol{p}_{ij}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})})$. 由 $\boldsymbol{Ap}_{ij}=\boldsymbol{p}_{ij}\boldsymbol{J}_j(\lambda_i)$ 可知

$$\begin{cases}(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)}=0\\(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{p}_{ij}^{(2)}=\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)}\\\cdots\cdots\\(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})}=\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij}-1)}\end{cases}\tag{2.5.7}$$

解这个方程组，可得 **Jordan 链**(Jordan chain) $\{\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)},\boldsymbol{p}_{ij}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})}\}$. 这个名称也可以这样理解：

$$\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})}\xrightarrow{\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}}\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij}-1)}\xrightarrow{\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}}\cdots\xrightarrow{\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}}\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)}\xrightarrow{\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I}}\boldsymbol{0}$$

其中，$\boldsymbol{p}_{ij}^{(1)}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 关于特征值 λ_i 的一个特征向量，$\boldsymbol{p}_{ij}^{(2)},\cdots,\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})}$ 则被称为 λ_i 的**广义特征向量**(generalized eigenvector)，而向量 $\boldsymbol{p}_{ij}^{(n_{ij})}$ 被称为 λ_i 的 n_{ij} 级**根向量**(root vector). 可以证明，由这些 Jordan 链拼成的向量组是线性无关的.

在图 2-19 中，存在 3 个 Jordan 链：$\{\boldsymbol{p}_{11}^{(1)}\}$，$\{\boldsymbol{p}_{12}^{(1)},\boldsymbol{p}_{12}^{(2)}\}$，$\{\boldsymbol{p}_{13}^{(1)},\boldsymbol{p}_{13}^{(2)},\boldsymbol{p}_{13}^{(3)},\boldsymbol{p}_{13}^{(4)},\boldsymbol{p}_{13}^{(5)}\}$，其中，$\boldsymbol{p}_{11}^{(1)}$、$\boldsymbol{p}_{12}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{p}_{13}^{(1)}$ 是特征值 λ_1 的 3 个线性无关的特征向量，余下的 5 个向量都是特征值 λ_1 的广义特征向量，并且 $\boldsymbol{p}_{11}^{(1)}$、$\boldsymbol{p}_{12}^{(2)}$ 和 $\boldsymbol{p}_{13}^{(5)}$ 分别是特征值 λ_1 的 1 级、2 级和 5 级的根向量.

特征值 λ_i 的几何重数就是 $\boldsymbol{A}_i(\lambda_i)$ 中 Jordan 块的个数，也就是特征值 λ_i 对应的Jordan 链的个数，亦即 λ_i 对应的线性无关特征向量的最大个数.

显然，当所有的 $n_{ij}=1$ 时，有 $k_i=n_i$，此时矩阵没有广义特征向量，特征值 λ_i 都是非亏损特征值，$\boldsymbol{p}_i$ 的各列都是 λ_i 的线性无关的特征向量，因此 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_j(\lambda_i)$ 都是 1 阶

的,此时 Jordan 标准型为

$$\boldsymbol{J}_A = \text{diag}\{\underbrace{\lambda_1,\cdots,\lambda_1}_{n_1},\underbrace{\lambda_2,\cdots,\lambda_2}_{n_2},\cdots,\underbrace{\lambda_t,\cdots,\lambda_t}_{n_t}\}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是**可对角化矩阵**(diagonalizable matrix),其 Jordan 分解特殊化为**谱分解**(spectral decomposition)或**特征值分解**(eigendecomposition),即

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P\Lambda P}^{-1} \tag{2.5.8}$$

其中,对角矩阵一般表示成 $\boldsymbol{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$,这里 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值.

例 2.5.1　求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}_A$ 及相应的 Jordan 变换矩阵 $\boldsymbol{P}$,其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -4 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{2.5.9}$$

解: $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1 = 2,\lambda_{2,3} = 1$,故设 $\boldsymbol{J}_A = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1(2) & \\ & \boldsymbol{A}_2(1) \end{pmatrix}$.

特征值 $\lambda_1 = 2$ 为单根,故 $\boldsymbol{A}_1(2) = 2$,且从 $(\boldsymbol{A} - 2\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 可得对应的特征向量为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = (0,0,1)^{\mathrm{T}}$.

对于二重特征值 $\lambda_{2,3} = 1$,由 $(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 只解得唯一的特征向量 $\boldsymbol{\alpha}_2 = (1,2,-1)^{\mathrm{T}}$,故特征值 $\lambda_{2,3} = 1$ 是亏损特征值,存在广义特征向量,此时 $\boldsymbol{A}_2(1)$ 中只有 1 个 Jordan 块,即 $\boldsymbol{A}_2(1) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. 求解非齐次线性方程组 $(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\alpha}_2$,可得所需的广义特征向量为 $\boldsymbol{\beta} = (0,1,-1)^{\mathrm{T}}$.

综合上述,可得

$$\boldsymbol{J}_A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.5.10}$$

Matlab 的内置函数 eig 能求出所有特征值,但却不能求出广义特征向量(为保证程序可运行,Matlab 填充以相应的特征向量). 好在 Matlab 后来提供了内置函数 jordan,其调用格式为

```
[V,J]= jordan(A)
```

注意返回的相似变换矩阵 $\boldsymbol{V}$ 未必是正交矩阵.

例 2.5.2　用 Jordan 标准型理论求解线性微分方程组

$$\begin{cases} x_1'(t) = -x_1 + x_2 \\ x_2'(t) = -4x_1 + 3x_2 \\ x_3'(t) = x_1 + 2x_3 \end{cases}$$

解：令 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x}'(t)=(x_1'(t),x_2'(t),x_3'(t))^{\mathrm{T}}$，则方程组的矩阵形式为

$$\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 即式 (2.5.9). 由上一题知 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{J}_A\boldsymbol{P}^{-1}$，这里 $\boldsymbol{J}_A$ 及 $\boldsymbol{P}$ 见式 (2.5.10)，因此 $\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{P}\boldsymbol{J}_A\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$，也就是 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{J}_A\boldsymbol{P}^{-1}x$. 注意到 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}'(t)=(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}(t))'$，通过线性变换 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$，显然可将方程组变形为

$$\boldsymbol{y}'(t)=\boldsymbol{J}_A\boldsymbol{y}$$

令 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,y_3)^{\mathrm{T}}$，则原方程组等价于下列微分方程组

$$y_1'(t)=2y_1,y_2'(t)=y_2+y_3,y_3'(t)=y_3$$

解得 $y_1=c_1\mathrm{e}^{2t}$，$y_2=c_2\mathrm{e}^{\mathrm{T}}+c_3t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}$，$y_3=c_3\mathrm{e}^{\mathrm{T}}$，从而由可逆线性变换 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$ 即 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$，可得原方程组的解

$$\begin{aligned}
x_1(t)&=c_2\mathrm{e}^{\mathrm{T}}+c_3t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\\
x_2(t)&=2c_2\mathrm{e}^{\mathrm{T}}+c_3(2t+1)\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\\
x_3(t)&=c_1\mathrm{e}^{2t}-c_2\mathrm{e}^{\mathrm{T}}-c_3(t+1)\mathrm{e}^{\mathrm{T}}
\end{aligned}$$

Matlab 提供了内置函数 dsolve 用于求解符号微分方程的符号解. 本题的调用格式为

```
[x1,x2,x3]= dsolve('Dx1= - 1* x1+ x2','Dx2= - 4* x1+ 3* x2','Dx3= x1+ 2* x3)
```

当然，返回的结果与手算未必完全相同.

例 2.5.3 在现代控制理论中，**线性定常系统**(Linear Time Invariant ，LTI)的状态空间描述为

$$\begin{cases}\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}\\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{D}\boldsymbol{u}\end{cases}$$

这里，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 表示系统内部状态变量之间的联系，称为**系统矩阵**；矩阵 $\boldsymbol{B}$ 称为**输入矩阵或控制矩阵**；矩阵 $\boldsymbol{C}$ 称为**输出矩阵或观测矩阵**；矩阵 $\boldsymbol{D}$ 称为**直接观测矩阵**. 此系统可简记为 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D})$.

对系统做可逆线性变换 $\bar{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$，则

$$\begin{cases}\dot{\bar{\boldsymbol{x}}}=\boldsymbol{P}^{-1}\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}\equiv\bar{\boldsymbol{A}}\bar{\boldsymbol{x}}+\bar{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{u}\\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}\bar{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{D}\boldsymbol{u}\equiv\bar{\boldsymbol{C}}\bar{\boldsymbol{x}}+\bar{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{u}\end{cases}$$

其中，$\bar{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$，$\bar{\boldsymbol{B}}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{B}$，$\bar{\boldsymbol{C}}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}$，$\bar{\boldsymbol{D}}=\boldsymbol{D}$.

显然，对任意方阵 $\boldsymbol{A}$ 而言，最简单的 $\bar{\boldsymbol{A}}$ 就是 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型. 此时虽然没有实现状态变量间的完全解耦，但也达到了可能达到的**最简耦合**形式. 因此线性变换就是状态空间的基底变换，即通过将系统 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D})$ 变换成等价的系统 $(\bar{\boldsymbol{A}},\bar{\boldsymbol{B}},\bar{\boldsymbol{C}},\bar{\boldsymbol{D}})$，以寻找描述同一系统的运动行为的尽可能简单的状态空间描述.

求下列状态方程的 Jordan 标准型:

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{x} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{u}$$

解:计算可得 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{J}_A\boldsymbol{P}^{-1}$，这里

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 4 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{J}_A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

因此经过可逆线性变换 $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}$ 后,系统矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和控制矩阵 $\boldsymbol{B}$ 分别变成了

$$\bar{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 6 & 3 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 4 & 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{J}$$

$$\bar{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{B} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 2 \\ 6 & 3 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

注意:此题中 $\varphi(\lambda) = |\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}| = \lambda^3 - 0\lambda^2 - 3\lambda - 2$，不考虑最高次项系数 1,剩下的三个系数的相反数,按升幂顺序,正好就是矩阵 A 最后一行的三个元素,故矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为特征多项式 $\varphi(\lambda)$ 的**友矩阵**(companion matrix).

例 2.5.4　求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}_A$ 及相应的 Jordan 变换矩阵 $\boldsymbol{P}$，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2 & -1 & -1 & -1 \\ 2 & 1 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -2 & -2 \end{pmatrix}$$

解法一: $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1 = 0, \lambda_{2,3,4} = -1$，故设 $\boldsymbol{J}_A = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1(0) & \\ & \boldsymbol{A}_2(-1) \end{pmatrix}$.

因为特征值 $\lambda_1 = 0$ 为单根,所以 $\boldsymbol{A}_1(0) = 0$，并可从 $(\boldsymbol{A} - 0\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 解得对应的特征向量为 $\boldsymbol{\alpha}_1 = (-1,3,1,-2)^{\mathrm{T}}$.

对于三重特征值 $\lambda_{2,3,4} = -1$，由 $(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 可解得两个特征向量为

$$\boldsymbol{\alpha}_2 = (1,0,0,-1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\alpha}_3 = (0,1,0,-1)^{\mathrm{T}}$$

因此 $\boldsymbol{A}_2(-1)$ 中有两个 Jordan 块,即

$$A_2(-1)=\begin{pmatrix}-1&1&\\&-1&\\&&-1\end{pmatrix} 或 A_2(-1)=\begin{pmatrix}-1&&\\&-1&1\\&&-1\end{pmatrix}$$

求解 $(A+I)\beta=\alpha_2$，无解！这让人不禁胸口一紧. 换 α_3 试试，求解 $(A+I)\beta=\alpha_3$，可得所需的广义特征向量 $\beta=(-1,0,1,0)^T$. 有惊无险，虚惊一场！

综合上述，可得

$$P=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\beta)=\begin{pmatrix}-1&1&0&-1\\3&0&1&0\\1&0&0&1\\-2&-1&-1&0\end{pmatrix},\ J_A=\begin{pmatrix}0&&&\\&-1&&\\&&-1&1\\&&&-1\end{pmatrix}$$

注意：(1)由于特征向量和广义特征向量的取法不唯一，因此相似变换矩阵 P 不唯一. 但注意，不计特征块的排列顺序，Jordan 矩阵 J 是唯一的.

(2)要特别当心的是，本题中如果选取三重特征值 $\lambda_{2,3,4}=-1$ 的特征向量为

$$\alpha_2=(1,0,0,-1)^T,\alpha_3{}'=(1,-1,0,0)^T$$

则 $(A+I)\beta=\alpha_2$ 和 $(A+I)\beta=\alpha_3{}'$ 都无解. 这说明在选取特征值 λ_i 的 k_i 个特征向量 $p_{i1}^{(1)}$，$p_{i2}^{(1)},\cdots,p_{ik_i}^{(1)}$ 时，前述求法存在问题，显然有待深化.

如何解决这种问题呢？一种解决办法是取 $\alpha=k_1\alpha_2+k_2\alpha_3{}'=(k_1+k_2,-k_2,0,-k_1)^T$，并适当选取待定系数 k_1,k_2，使得 $(A+I)\beta=\alpha$ 有解. 由于

$$(A+I,\alpha)=\begin{pmatrix}-1&-1&-1&-1&k_1+k_2\\2&2&3&2&-k_2\\1&1&1&1&0\\-1&-1&-2&-1&-k_1\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1&1&1&1&0\\0&0&1&0&-k_2\\0&0&0&0&k_1+k_2\\0&0&0&0&0\end{pmatrix}$$

因此 $k_1+k_2=0$ 时方程组有解. 不妨取 $k_1=-k_2=1$，得 $\alpha=\alpha_3=(0,1,0,-1)^T$. 以下同前，略去.

例 2.5.2 Jordan 标准型的一般求法.

设 λ_i 为复方阵 A 的特征值，其代数重数为 σ_i，k 为使得等式

$$\operatorname{rank}(A-\lambda_i I)^k=\operatorname{rank}(A-\lambda_i I)^{k+1} \tag{2.5.11}$$

成立的最小正整数(称为特征值 λ_i 的**指标**(index))，即使得

$$(A-\lambda_i I)^k x=\mathbf{0},(A-\lambda_i I)^{k-1}x\neq\mathbf{0} \tag{2.5.12}$$

有非零解的最小正整数.

根据前面的分析，λ_i 的指标 k 就是 λ_i 的最大 Jordan 块的阶数.

Jordan 标准型的一般求法如下：

(1)规定 $r_0=n$. 计算 $r_t\equiv\operatorname{rank}(A-\lambda_i I)^T$，$t=0,1,2,\cdots$；

(2)计算 $d_t\equiv r_{t-1}-r_t,t=1,\cdots,k+1$，直至出现 $d_{k+1}=0$；

(3)计算 $\delta_t \equiv d_t - d_{t+1}, t = 1,2,\cdots,k$.

按此计算出的 δ_t 就是 t 阶 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_t(\lambda_i)$ 的个数. 不计顺序,就唯一确定了 Jordan 标准型.

至于相应的子矩阵 $\boldsymbol{p}_i$ 的构造,我们通过一个例子来说明. 假定 $n=10,\sigma_i=8,k=4,r_1=7,r_2=4,r_3=3,r_4=2$,则 $r_5=2$, $d_1=3,d_2=3,d_3=1,d_4=1,d_5=0$, 从而 $\delta_1=0$, $\delta_2=2,\delta_3=0,\delta_4=1$. 因此矩阵有 1 个 4 阶 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_4(\lambda_i)$ 和 2 个 2 阶 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_2(\lambda_i)$.

取 $\boldsymbol{p}_{i1}$ 满足式(2.5.12),则可得最长的 Jordan 链 $\{(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})^3\boldsymbol{p}_{i1},(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})^2\boldsymbol{p}_{i1},(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\boldsymbol{p}_{i1},\boldsymbol{p}_{i1}\}$. 对于另外两条长为 2 的 Jordan 链,可选取为 $\{(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\boldsymbol{p}_{i2},\boldsymbol{p}_{i2}\}$ 和 $\{(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\boldsymbol{p}_{i3},\boldsymbol{p}_{i3}\}$, 这里 $\boldsymbol{p}_{i1},\boldsymbol{p}_{i2},\boldsymbol{p}_{i3}$ 线性无关, $(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})^2\boldsymbol{p}_{il}=\boldsymbol{0}$ 且 $(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})\boldsymbol{p}_{il}\neq\boldsymbol{0}$, $l=2,3$.

此方法的证明可参见文献[16]. 下面用这种方法重解例 2.5.4.

解法二: 对于三重特征值 $\lambda_{2,3,4}=-1$, 计算可得 $r_0=4,r_1=2,r_2=r_3=1,k=2$, $d_1=2,d_2=1,d_3=0,\delta_1=1,\delta_2=1$.

解 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})^2\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$, $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$, 得非零向量 $\boldsymbol{\beta}=(1,0,-1,0)^{\mathrm{T}}$, 从而得最长的 Jordan 链

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})\boldsymbol{\beta}=(0,-1,0,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}=(1,0,-1,0)^{\mathrm{T}}$$

解 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})^1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$, 得非零向量 $\boldsymbol{\alpha}_2=(1,-1,0,0)^{\mathrm{T}}$. 显然 $\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}$ 线性无关.

令 $\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})=\begin{pmatrix}-1&1&0&1\\3&-1&-1&0\\1&0&0&-1\\-2&0&1&0\end{pmatrix}$. 验算可知

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{J}_A=\begin{pmatrix}0&&&\\&-1&&\\&&-1&1\\&&&-1\end{pmatrix}$$

2.5.3　Jordan 其人

Jordan 其人,说的是 Jordan 标准型的提出者卡米尔·约当(Camille Jordan,见图 2-20). 数学史上有好几位约当,个个都惊才绝艳,让人难以超越. 比如有些学者将矩阵化成行阶梯型的过程称为高斯消元法,而将矩阵化成行最简型的过程称为高斯-约当消元法,这里的约当就是另一位测量技师威廉·约当(Wilhelm Jordan,1842—1899),这个成果发表于 1888 年,来自于他试图寻找方法以极小化测量数据的平方误差的工作. 另一位约当更是了不得,他就是理论物理学家和数学物理学家帕斯库尔·约当(Pascual Jordan,1902—1980),量子力学的主要创立者,Jordan 代数的发明者,曾被提名为诺贝尔奖得主. 关于他,曹天元的《上帝掷骰子吗:量子物理史话》里有段

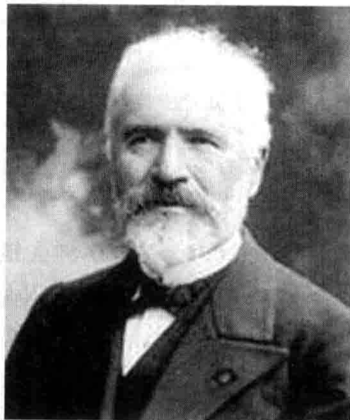


图 2-20　卡米尔·约当(1838—1922)

精彩的"饭后闲话". 可是在物理上,他完全笼罩在玻恩和海森堡的耀眼光辉之中,而在数学上的知名度,则远逊于卡米尔·约当. 不过这完全可归结于他咎由自取,谁让他当初同情纳粹,而且战后还支持政府拥有战术性核武器,从而与大多数原子物理学家的主张背道而驰. 卡米尔·约当的父亲和舅舅都毕业于巴黎综合理工学院(即 X),舅舅夏凡纳(Puvis de Chavannes,1824—1898)后来成了象征主义绘画的代表人物. 1855 年,卡米尔循着父辈的足迹,进入 X 攻读数学,1861 年博士毕业,次年娶了里昂副市长之女为妻. 同那个时代大多数数学家一样,他以工程师为业. 1876 年起他被聘为 X 的教授.

卡米尔几乎涉猎了当时所有的数学研究领域,这从他的文集可以看出. 文集前两卷的主题是有限群,第三卷涉及线性和多重线性代数以及数论,第四卷则涉及多面体的拓扑、微分方程以及机械力学. 他在有限群上的贡献最大,可以说是系统论述有限群的第一人,为有限群理论的形成做出了很大的贡献. 他 1870 年出版的《代换论及代数方程论》成为几十年内的经典之作. 在该书中,他提出了矩阵的 Jordan 标准型,并将伽罗瓦的置换群理论纳入到数学的中心理论之中. 受当时晶体结构研究的影响,他将群理论引入到几何之中,并考虑了欧几里得变换群的分类问题. 这吸引了李(Sophus Lie,1842—1899,李代数的发明人)和克莱因(Felix Klein,1849—1925,1872 年发表了意义深远的"埃尔朗根纲领")等青年才俊的登门拜访. 后来他还证明了素因子置换群和有限性定理.

尽管他不知晓莫比乌斯(August Ferdinand Möbius,1790—1868,莫比乌斯带的发现者)的工作,但他以自己掌握的黎曼的成果为基础,在 1866 年引入了许多拓扑概念,诸如同伦路径、曲面的同伦群,等等. 他在《分析教程》(1882—1887)中提出的约当曲线定理,即平面上的任何简单闭曲线都把这平面分成两个区域(内部和外部),如今更是闻名遐迩. 他还在该书中定义了曲线的长度. 众所周知,这本书为如今的分析学教科书设定了基调. 有意思的是,大约 60 年前,柯西的《分析教程》也为如今的高等数学教科书树立了蓝本. 他们面对的,可都是 X 的学生,即毕业后以民事和军事工程师为职业的学生.

2.6 方阵高次幂的计算

在线性代数中,我们已接触过方阵高次幂计算的多种方法,如归纳法、二项展开式法、行乘列法,但它们处理的大都是特殊矩阵的高次幂. 利用特征值分解可以计算可对角化方阵的高次幂,而利用 Jordan 分解则可以计算任意方阵的高次幂.

2.6.1 从两个例子说起

计算方阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意次幂 $\boldsymbol{A}^n$ 是矩阵分析与计算中的基本问题. 口说无凭,兹举两例为证.

例 2.6.1 **(马尔科夫链)**设某小城市共有 30 万人从事农、工、商三业. 假定这个总人数始终保持不变. 社会调查显示:

(1) 目前有 15 万人务农,9 万人务工,6 万人经商;

(2) 在务农人员中,每年约有 20%改为务工,10%改为经商;

(3) 在务工人员中,每年约有 20%改为务农,10%改为经商;

(4) 在经商人员中,每年约有 10%改为务农,10%改为务工.

试分析从事这三种职业的人员总数的变化趋势.

若用向量 $\boldsymbol{\alpha}_i = (x_i, y_i, z_i)^{\mathrm{T}}$ 表示第 i 年后从事这三种职业的人员总数，则初始向量为 $\boldsymbol{\alpha}_0 = (15,9,6)^{\mathrm{T}}$. 根据题意，1 年后从事这三种职业的人员总数应为

$$\begin{cases} x_1 = 0.7x_0 + 0.2y_0 + 0.1z_0 \\ y_1 = 0.2x_0 + 0.7y_0 + 0.1z_0 \\ z_1 = 0.1x_0 + 0.1y_0 + 0.8z_0 \end{cases}$$

写成矩阵形式，即 $\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\alpha}_0$，这里 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.2 & 0.1 \\ 0.2 & 0.7 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.8 \end{pmatrix}$ 称为**迁移矩阵**(transfer matrix).

同理可知，$\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\alpha}_1 = \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{\alpha}_0$，$\boldsymbol{\alpha}_3 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{A}^3\boldsymbol{\alpha}_0$，一般地，我们得到**马尔可夫链**(Markov chain)：

$$\boldsymbol{\alpha}_n = \boldsymbol{A}^n\boldsymbol{\alpha}_0 \quad (n = 1,2,3,\cdots) \tag{2.6.1}$$

“阿嚏！哎，这不是 $\boldsymbol{A}^n$ 嘛？这不是 $\boldsymbol{A}^n$ 嘛！”(严顺开《张三其人》)

例 2.6.2　**(线性滤波器)**在数字信号处理中，可以用如下的 n 阶线性差分方程来描述一个**线性滤波器**(a_0 和 a_n 不为零)：

$$z_k = a_0 y_{k+n} + a_1 y_{k+n-1} + \cdots + a_{n-1} y_{k+1} + a_n y_k \tag{2.6.2}$$

其中，a_0 通常为 1，序列 $\{y_k\}$ 代表输入信号，序列 $\{z_k\}$ 则代表输出信号. 当 $\{z_k\}$ 是零序列时，即

$$0 = a_0 y_{k+n} + a_1 y_{k+n-1} + \cdots + a_{n-1} y_{k+1} + a_n y_k \tag{2.6.3}$$

称方程 (2.6.3) 为 n **阶线性齐次差分方程**，此时输入 $\{y_k\}$ 被变换为零信号.

例如，对二阶线性齐次滤波器 $0 = \frac{1}{2\sqrt{2}} y_{k+2} + \frac{1}{2} y_{k+1} + \frac{1}{2\sqrt{2}} y_k$，当输入连续信号 $y = \cos(\frac{3}{4}\pi t)$ 的整数采样 $\{y_k\} = \{\cdots, y_0 = 1, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -1, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 1, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \cdots\}$ 时，计算可知输出 $\{z_k\}$ 就是零序列，这说明信号 $\{y_k\}$ 被过滤掉了.

设方程 (2.6.3) 的解集为 H，定义 H 到 $\mathbb{R}^n$ 的线性映射

$$\mathcal{T}: \{y_k\} \mapsto (y_0, y_1, y_2, \cdots, y_{n-1})^{\mathrm{T}}$$

可以证明$\mathcal{T}$是一个同构映射，因此 H 是一个线性空间，且 $\dim H = \dim \mathbb{R}^n = n$.

方程 (2.6.3) 的一种解法是**降阶法**，即用等价的一阶差分方程组来代替它. 事实上，若令

$$\boldsymbol{x}_k = \begin{pmatrix} y_k \\ y_{k+1} \\ \vdots \\ y_{k+n-1} \end{pmatrix}, \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ -a_n & -a_{n-1} & \cdots & -a_2 & -a_1 \end{pmatrix}$$

则方程(2.6.3)就转化为 $\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k$，注意这里的 $\boldsymbol{A}$ 正是多项式 $f(x)=a_n+a_{n-1}x+\cdots+a_1x^{n-1}+x^n$ 的友矩阵. 显然 $\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k-1}=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x}_{k-2}=\cdots=\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}_0$. “你看这是不是高次幂啊?”

2.6.2 Jordan 分解法

由 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$ 可知，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^n&=(\boldsymbol{PJP}^{-1})(\boldsymbol{PJP}^{-1})\cdots(\boldsymbol{PJP}^{-1})=\boldsymbol{PJ}(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P})\boldsymbol{J}(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P})\boldsymbol{J}\cdots(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P})\boldsymbol{JP}^{-1}\\&=\boldsymbol{PJ}^n\boldsymbol{P}^{-1}\end{aligned}$$

即

$$\boldsymbol{A}^n=\boldsymbol{PJ}^n\boldsymbol{P}^{-1}\tag{2.6.4}$$

这样，一般的高次幂 $\boldsymbol{A}^n$ 的计算就转化为特殊的高次幂 $\boldsymbol{J}^n$ 的计算.

特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 特殊化为可对角化矩阵时，矩阵 $\boldsymbol{J}$ 就特殊化为对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，从而有

$$\boldsymbol{A}^n=\boldsymbol{P\Lambda}^n\boldsymbol{P}^{-1}\tag{2.6.5}$$

例 2.6.3 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^5-4\boldsymbol{A}^4+6\boldsymbol{A}^3-6\boldsymbol{A}^2+6\boldsymbol{A}-3\boldsymbol{I}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 与例 2.5.1 相同.

解法一:Jordan 分解法.

$\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$，其中 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{J}$ 见式(2.5.10). 因此

$$\boldsymbol{J}^n=\begin{pmatrix}2&&\\&1&1\\&&1\end{pmatrix}^n=\begin{pmatrix}2^n&\\&\begin{pmatrix}1&1\\&1\end{pmatrix}^n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2^n&&\\&1^n&n\\&&1^n\end{pmatrix}$$

从而

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{A})&=\boldsymbol{A}^5-4\boldsymbol{A}^4+6\boldsymbol{A}^3-6\boldsymbol{A}^2+6\boldsymbol{A}-3\boldsymbol{I}\\&=\boldsymbol{PJ}^5\boldsymbol{P}^{-1}-4\boldsymbol{PJ}^4\boldsymbol{P}^{-1}+6\boldsymbol{PJ}^3\boldsymbol{P}^{-1}-6\boldsymbol{PJ}^2\boldsymbol{P}^{-1}+6\boldsymbol{PJP}^{-1}-3\boldsymbol{PIP}^{-1}\\&=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}^5-4\boldsymbol{J}^4+6\boldsymbol{J}^3-6\boldsymbol{J}^2+6\boldsymbol{J}-3\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}\\&=\boldsymbol{P}f(\boldsymbol{J})\boldsymbol{P}^{-1}\quad(\text{为什么不直接算出各个 }\boldsymbol{A}^n?)\\&=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&2&1\\1&-1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0\\0&2&1\\1&-1&-1\end{pmatrix}^{-1}\\&=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&2\\1&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1&1&1\\1&0&0\\-2&1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2&1&0\\-4&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}\\&=\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}\end{aligned}$$

思考: 最后的结果算式 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}$ 显然很简单，这难道仅仅是巧合吗?

Matlab 的内置函数 polyvalm(ca,A) 可用于计算矩阵多项式. 本题的调用格式为

```
ca= [1 - 4 6 - 6 6 - 3];  B= polyvalm(ca,A)   %  注意 ca 是多项式系数,降幂排列
```

例 2.6.4　求 5 阶 Jordan 块 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_5(2)$ 的幂 $\boldsymbol{J}^n$.

解:将 $\boldsymbol{J}$ 分解为 $\boldsymbol{J}=2\boldsymbol{I}+\boldsymbol{N}$, 其中 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{J}_5(0)$. 计算可知

$$\boldsymbol{N}^2=\begin{pmatrix}0&0&1&&\\&0&0&1&\\&&0&0&1\\&&&0&0\\&&&&0\end{pmatrix},\boldsymbol{N}^3=\begin{pmatrix}0&0&0&1&\\&0&0&0&1\\&&0&0&0\\&&&0&0\\&&&&0\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{N}^4=\begin{pmatrix}0&0&0&0&1\\&0&0&0&0\\&&0&0&0\\&&&0&0\\&&&&0\end{pmatrix},\boldsymbol{N}^k=\boldsymbol{O}\quad(k\geqslant 5)$$

因此根据牛顿二项展开式,可知

$$\boldsymbol{J}^n=(\boldsymbol{N}+2\boldsymbol{I})^n=\sum_{i=0}^{n}C_n^i\boldsymbol{N}^i\,(2\boldsymbol{I})^{n-i}=\sum_{i=0}^{4}C_n^i 2^{n-i}\,\boldsymbol{N}^i$$

$$=\begin{pmatrix}2^n&C_n^1\cdot 2^{n-1}&C_n^2\cdot 2^{n-2}&C_n^3\cdot 2^{n-3}&C_n^4\cdot 2^{n-4}\\&2^n&C_n^1\cdot 2^{n-1}&C_n^2\cdot 2^{n-2}&C_n^3\cdot 2^{n-3}\\&&2^n&C_n^1\cdot 2^{n-1}&C_n^2\cdot 2^{n-2}\\&&&2^n&C_n^1\cdot 2^{n-1}\\&&&&2^n\end{pmatrix}$$

如果 $n=3$, 显然 $\boldsymbol{J}^n$ 右上角的元素 $C_n^4\cdot 2^{n-4}$ 中的 C_n^4 没有意义,而计算可知此时该元素应该为零. 由于这种情况具有一般性,因此我们规定:当 $k>n$ 时, $C_n^k=0$.

一般地,可以证明,对于 t 阶 Jordan 矩阵 $J_t(\lambda)$, 成立

$$\boldsymbol{J}_t^n(\lambda)=\begin{pmatrix}\lambda^n&C_n^1\lambda^{n-1}&C_n^2\lambda^{n-2}&\cdots&C_n^{t-1}\lambda^{n-(t-1)}\\&\lambda^n&C_n^1\lambda^{n-1}&\cdots&C_n^{t-2}\lambda^{n-(t-2)}\\&&\lambda^n&\ddots&\vdots\\&&&\ddots&C_n^1\lambda^{n-1}\\&&&&\lambda^n\end{pmatrix}\tag{2.6.6}$$

其中,当 $k>n$ 时,规定 $C_n^k=0$.

当然,更多的时候我们不是直接计算 $\boldsymbol{A}^n$.

例 2.6.5　**(斐波那契数列)**　电影《达 · 芬奇密码》中出现的那串神秘的数字“13,

3,2,21,1,1,8,5”,按升序重新排列后,就是斐波那契数列. 众所周知,$\varphi=\frac{1}{2}(\sqrt{5}-1)\approx 0.618$ 被称为黄金数,大自然中处处有“黄金”. 如今斐波那契数列已被广泛应用于现代物理、准晶体结构、化学等领域.

我们来求斐波那契(Leonardo Fibonacci,1175—1250,意大利数学家,最早研究斐波那契数列)数列 $\{f_n\}$ 的通项公式,其中

$$f_0=f_1=0,f_{n+1}=f_n+f_{n-1} \tag{2.6.7}$$

令 $\boldsymbol{F}_n=(f_n,f_{n+1})^{\mathrm{T}}$,则式(2.6.7)被改写为矩阵向量形式:

$$\boldsymbol{F}_n=\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}_{n-1},\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix},\boldsymbol{F}_0=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{2.6.8}$$

递推可知

$$\boldsymbol{F}_n=\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}_{n-1}=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{F}_{n-2}=\cdots=\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{F}_0 \tag{2.6.9}$$

计算可知 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $a_1=\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$, $a_2=\frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$,相应的特征向量为 $\boldsymbol{h}_1=(1,a_1)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{h}_2=(1,a_2)^{\mathrm{T}}$,并且有 $\boldsymbol{F}_0=\frac{1}{\sqrt{5}}\boldsymbol{h}_1-\frac{1}{\sqrt{5}}\boldsymbol{h}_2$,代入式(2.6.9),并注意到 $\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{h}_i=a_i^n\boldsymbol{h}_i(i=1,2)$,即得

$$\boldsymbol{F}_n=\frac{1}{\sqrt{5}}\boldsymbol{A}^n(\boldsymbol{h}_1-\boldsymbol{h}_2)=\frac{1}{\sqrt{5}}(\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{h}_1-\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{h}_2)=\frac{1}{\sqrt{5}}(a_1^n\boldsymbol{h}_1-a_2^n\boldsymbol{h}_2)$$

从而可知

$$f_n=\frac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1}-\left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1}\right] \tag{2.6.10}$$

Matlab 提供了运算符“ ^ ”可用于直接计算矩阵的高次幂,比如本题的调用格式就是

```
N= diag(ones(1,4),1);I= eye(5); J= 2* I+ B; Jn= J^n
```

当 n 是整数时,Matlab 是通过不断平方来计算 $\boldsymbol{A}^n$ 的,比如 $\boldsymbol{A}^7$ 的计算方法就是

$$\boldsymbol{A}^7=(\boldsymbol{A}^2)^2\cdot\boldsymbol{A}^2\cdot\boldsymbol{A}$$

2.6.3 Cayley-Hamilton 定理及最小多项式

Jordan 标准型的计算复杂,而特征多项式与之关系密切. 由于 Cayley 和 Hamilton 发现矩阵的特征多项式是矩阵的零化多项式(相当于零因子式),因此类比多项式的带余除法理论,以适当的零化多项式为商,将矩阵多项式转化为相应的余式,从而降低多项式的次数,就成了另一种思路.

定理 2.6.1 (Cayley-Hamilton 定理) n 阶方阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是其特征多项式 $\varphi(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|$ 的“根”,即 $\varphi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{O}$.

分析:从形式上看,当 $n=1$ 时, $\varphi(\boldsymbol{A})=|\boldsymbol{A}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=0$,即此时 $\boldsymbol{A}$ 为 $\varphi(\lambda)=0$ 的根.

因此我们将 $\boldsymbol{A}$ 形象地称为特征方程 $\varphi(\lambda)=0$ 的"根",虽然一般地,$\varphi(\boldsymbol{A})\neq|\boldsymbol{AI}-\boldsymbol{A}|$.

证明:设方阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$. 我们将 $\boldsymbol{J}$ 表示为

$$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & k_1 & & \\ & \lambda_2 & \ddots & \\ & & \ddots & k_{n-1} \\ & & & \lambda_n\end{pmatrix}$$

其中,$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,$k_i=1$ 或 0, $i=1,2,\cdots,n-1$. 则 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式可表示为

$$\varphi(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=(\lambda-\lambda_1)(\lambda-\lambda_2)\cdots(\lambda-\lambda_n)$$

从而

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{A})&=(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{A}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{A}-\lambda_n\boldsymbol{I})\\&=(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{PJP}^{-1}-\lambda_n\boldsymbol{I})\\&=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{J}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{J}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{J}-\lambda_n\boldsymbol{I})\boldsymbol{P}^{-1}\end{aligned}$$

计算可知,$(\boldsymbol{J}-\lambda_1\boldsymbol{I})(\boldsymbol{J}-\lambda_2\boldsymbol{I})\cdots(\boldsymbol{J}-\lambda_n\boldsymbol{I})$ 是零矩阵,因此 $\varphi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{POP}^{-1}=\boldsymbol{O}$. 证毕.

定义 2.6.1　设 $f(\lambda)$ 是关于 λ 的多项式. 如果 $f(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{O}$, 则称 $f(\lambda)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**零化多项式**(annihilator polynomial).

显然矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $\varphi(\lambda)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最常见的零化多项式.

例 2.6.6　用 Cayley-Hamilton 定理重解例 2.6.3.

解法二:基于特征多项式的 Cayley-Hamilton 法.

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为 $\varphi(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=\lambda^3-4\lambda^2+5\lambda-2$, 则 $\varphi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{O}$. 由于

$$f(\lambda)=\lambda^5-4\lambda^4+6\lambda^3-6\lambda^2+6\lambda-3$$

由多项式除法可知 $f(\lambda)=(\lambda^2+1)\varphi(\lambda)+\lambda-1$, 因此

$$f(\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{A}^2+\boldsymbol{I})\varphi(\boldsymbol{A})+\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix}-2 & 1 & 0\\ -4 & 2 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

对于多项式 $f(\lambda)$ 的带余除式 $f(\lambda)=q(\lambda)g(\lambda)+r(\lambda)$, Matlab 提供了内置函数 deconv,可用于求出商式 $q(\lambda)$ 和余式 $r(\lambda)$, 调用格式为

```
[q, r] = deconv(f, g)
```

其中,常数都表示降幂排列的相应多项式的系数.

显然,除式 $g(\lambda)$ 的次数越低,余式 $r(\lambda)$ 的次数自然也越低,这样计算量就会大大降低.

定义 2.6.2　在矩阵 A 的所有零化多项式中,次数最低的首一(首项系数为 1)多项式称为 $\boldsymbol{A}$ 的**最小多项式**(minimal polynomial),记为 $m(\lambda)$.

例如,在例 2.6.3 中,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为 $\varphi(\lambda)=(\lambda-2)(\lambda-1)^2$,我们自然猜测它的最小多项式是否为 $m(\lambda)=(\lambda-2)(\lambda-1)$,计算可知 $m(\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{A}-2\boldsymbol{I})(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})\neq\boldsymbol{O}$,可见这仅仅是"想得美"而已. 问题是我们为什么会有这种想法呢?

换个矩阵试试. 可到哪儿去找这样的矩阵呢? 从东找到西,从南找到北,历经千山万水,一路寻寻觅觅,我们终于觅得一个矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3&-3&2\\-1&5&-2\\-1&3&0\end{pmatrix}$,它的特征多项式为 $\varphi(\lambda)=(\lambda-2)^2(\lambda-4)$,那么它的最小多项式是否为 $m(\lambda)=(\lambda-2)(\lambda-4)$ 呢? 验算可知确有 $(\boldsymbol{A}-2\boldsymbol{I})(\boldsymbol{A}-4\boldsymbol{I})=\boldsymbol{O}$! 这不禁让人联想到沈从文先生的轶事. 历尽艰辛,沈先生终得遂所愿,盼来了佳音:"乡下人,来喝杯甜酒吧!"

当然,这样误打误撞显然不是个办法,我们需要一种机制. 欲知详情,请移步至 6.4.3 小节.

习 题 二

2.1 在 $\mathbb{R}^4$ 中,求向量 $\boldsymbol{x}$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_4$ 下的坐标,其中:

(1) $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(1,1,-1,-1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_3=(1,-1,1,-1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_4=(1,-1,-1,1)^{\mathrm{T}}$; $x=(1,2,1,1)^{\mathrm{T}}$;

(2) $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,0,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(2,1,3,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_3=(1,1,0,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_4=(0,1,-1,-1)^{\mathrm{T}}$; $x=(0,0,0,1)^{\mathrm{T}}$.

2.2 已知 $\mathbb{R}^3$ 中的两组基:(I):$\boldsymbol{\alpha}_1=(1,-1,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(0,1,-1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$ 和 (II):$\boldsymbol{\beta}_1=(1,-1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_2=(0,1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_3=(1,0,1)^{\mathrm{T}}$. 求:

(1)基 (I) 到基 (II) 的过渡矩阵 $\boldsymbol{P}$;

(2)在基 (I) 与基 (II) 下有相同坐标向量的所有向量.

2.3 判断以下集合对于所给运算是否构成 $\mathbb{R}$ 上的线性空间:

(1)全体上三角(下三角)矩阵,对于矩阵的加法和数乘;

(2)迹为 0 的全体矩阵,对于矩阵的加法和数乘;

(3)平面上不平行于某一向量的全部向量的集合,对于通常向量的加法和数乘.

2.4 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的列向量组,证明 $R(\boldsymbol{A})=\operatorname{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$.

2.5 证明数域 $\mathbb{F}$ 上线性空间 V 的性质(A5)、(A6)、(A7)、(M3)和(M4).

2.6 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times k}$. 证明: $R(\boldsymbol{AB})=R(\boldsymbol{A})$ 的充要条件是存在 $\boldsymbol{C}\in\mathbb{R}^{k\times n}$, 使得 $\boldsymbol{ABC}=\boldsymbol{A}$.

2.7 使用范德蒙德行列式证明 $\mathbb{P}[x]_n$ 的标准基 $1,x,x^2,\cdots,x^{n-1}$ 线性无关.

2.8 设线性空间 V 中向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 与向量组 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 满足关系式:

$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P}$$

其中, $\boldsymbol{P}$ 是 m 阶矩阵. 证明下面三个条件(a)(b)(c)中任意两个成立时,余下的也成立:

(a) $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 线性无关;(b) $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 线性无关;(c) $\boldsymbol{P}$ 可逆.

2.9 已知 $\mathbb{R}^{2\times 2}$ 中的两组基:

(I): $\boldsymbol{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{A}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{A}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{A}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$,

(II): $\boldsymbol{B}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{B}_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{B}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{B}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$

求:(1)基 (I) 到基 (II) 的过渡矩阵 $\boldsymbol{P}$;

(2)矩阵 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$ 在基 (I) 与基 (II) 下的坐标向量;

(3)在基 (I) 与基 (II) 下有相同坐标向量的矩阵.

2.10 已知 $\mathbb{P}[t]_3$ 中的两组基为:

(I): $f_1(t) = 1, f_2(t) = 1+t, f_3(t) = 1+t+t^2$;

(II): $g_1(t) = 1-t^2, f_2(t) = 1-t, f_3(t) = t-t^2$.

求:(1)基 (I) 到基 (II) 的过渡矩阵 $\boldsymbol{P}$;

(2)多项式 $f(t) = 3+2t+t^2$ 在基 (I) 下的坐标向量.

2.11 设线性空间 V 中基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}$. 证明有非零向量 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 使得 $\boldsymbol{\alpha}$ 在两组基下的坐标向量相同的充要条件是 1 为矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的特征值.

2.12 证明数域 $\mathbb{R}$ 上所有 n 阶反对称矩阵的集合 $\mathbb{SSR}^{n\times n}$ 构成线性空间,其维数为 $\frac{1}{2}n(n-1)$, 并求其一组基.

2.13 证明定理 2.3.2.

2.14 判断下列集合是否构成 $\mathbb{P}[x]$ 的子空间,其中 $f(x) \in \mathbb{P}[x]$:

(1) $V_1 = \{p(x) \mid p(x) = 0\}$; (2) $V_2 = \{p(x) \mid p(x)$ 的常数项为 $0\}$;

(3) $V_3 = \{p(x) \mid p(-x) = p(x)\}$.

2.15 判断下列集合是否构成 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的子空间,其中 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$:

(1) $V_1 = \{\boldsymbol{A} \mid \det\boldsymbol{A} = 0\}$; (2) $V_2 = \{\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}\}$; (3) $V_3 = \{\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{O}\}$.

2.16 设 U 为所有与矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 可交换的矩阵的集合,即 $U = \{\boldsymbol{X} \mid \boldsymbol{AX} = \boldsymbol{XA}, \boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}\}$.

(1)证明 U 构成 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的子空间;

(2)当 $n = 2$ 且 $\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$ 时,求 U 的一组基与维数,并写出 U 中矩阵的一般形式.

2.17 证明定理 2.3.5.

2.18 已知 $\boldsymbol{\alpha}_1 = (1,2,1,0)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\alpha}_2 = (-1,1,1,1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\beta}_1 = (2,-1,0,1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{\beta}_2 = (1,-1,3,7)^{\mathrm{T}}$, $V_1 = \mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2)$, $V_2 = \mathrm{span}(\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2)$. 求 $V_1 \cap V_2$ 和 $V_1 + V_2$ 的基与维数.

2.19 设 V_1, V_2 是数域 $\mathbb{F}$ 上 n 维线性空间 V 的两个子空间.

(1)若 $\dim V_1 + \dim V_2 > n$, 则 V_1 与 V_2 必含有公共的非零向量;

(2)若 $V_1 \subset V_2$ 且 $\dim V_1 = \dim V_2$, 则 $V_1 = V_2$;

(3)若 $V_i \neq \{\boldsymbol{\theta}\}$ 且 $V_i \neq V\ (i = 1,2)$,则 $V_1 \cup V_2 \neq V$, 即存在 $\boldsymbol{\alpha} \in V$, 但 $\boldsymbol{\alpha} \notin V_1$ 且 $\boldsymbol{\alpha} \notin V_2$.

2.20 已知 $\mathbb{P}[t]_4$ 的子空间:

$U=\{f(t)\mid f(t)=a_0+a_1t+a_2t^2+a_3t^3, 2a_0+a_1+a_2=0, a_1+a_2+2a_3=0\}$

求：(1) U 的一组基和维数；

(2) U 在 $\mathbb{P}[t]_4$ 中的一个补子空间.

2.21 设 V_1,V_2 分别是数域 $\mathbb{R}$ 上的线性方程组 $x_1+x_2+\cdots+x_n=0$ 与 $x_1=x_2=\cdots=x_n$ 的解空间，证明

$$\mathbb{R}^n=V_1\oplus V_2$$

2.22 下面所定义的变换中是否为线性变换？请说明理由.

(1)在 $\mathbb{R}^3$ 中，$\mathcal{T}(x_1,x_2,x_3)=(x_1^2,x_2+x_3,x_3)$；

(2)在 $\mathbb{R}^3$ 中，$\mathcal{T}(x_1,x_2,x_3)=(2x_1-x_2,x_2+2x_3,x_1)$；

(3)在 $\mathbb{P}[x]$ 中，$\mathcal{T}(f(x))=f(x-1)$.

2.23 证明 $\mathcal{T}'\mathcal{T}\in L(V_1,V_3)$，这里 $\mathcal{T}\in L(V_1,V_2)$ 且 $\mathcal{T}'\in L(V_2,V_3)$.

2.24 (**线性变换的构造**)设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是线性空间 V 上的一组基. 对于 V 中任意一组向量 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$，必存在唯一的线性变换 $\mathcal{T}$，使得 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i)=\boldsymbol{\beta}_i$ ($i=1,2,\cdots,n$). 特别地，$\mathcal{T}$ 是可逆的当且仅当 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 也是 V 的基.

2.25 设 $\mathcal{T}$ 是 n 维线性空间 V 上的线性变换，且对某个向量 $\boldsymbol{\alpha}\in V$，有 $\mathcal{T}^{n-1}(\boldsymbol{\alpha})\neq\boldsymbol{\theta}$，但 $\mathcal{T}^n(\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\theta}$. 证明向量组 $\boldsymbol{\alpha},T(\boldsymbol{\alpha}),\cdots,\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha}$ 是 V 的一组基，并求 $\mathcal{T}$ 在此基下的矩阵.

2.26 已知 $\mathbb{R}^3$ 中的线性变换 T 在基 (II)：

$$\boldsymbol{\beta}_1=(-1,1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_2=(1,0,-1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_3=(0,1,1)^{\mathrm{T}}$$

下的矩阵为 $\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&0&1\\1&1&0\\-1&2&1\end{pmatrix}$.

求：(1) $\mathcal{T}$ 在 $\mathbb{R}^3$ 的标准基 (I)：$\boldsymbol{e}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{e}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{e}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$ 下的矩阵 $\boldsymbol{A}$；

(2)向量 $\boldsymbol{\eta}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$ 及 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\eta})$ 在基 (II) 下的坐标向量.

2.27 已知线性空间 $U=\{\boldsymbol{X}=(x_{ij})_{2\times 2}\mid x_{11}+x_{22}=0\}$ 上的线性变换

$$\mathcal{T}(X)=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$$

其中，$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&1\\0&1\end{pmatrix}$. 求 U 的一组基，使得 $\mathcal{T}$ 在该基下的矩阵为对角矩阵.

2.28 已知 $\mathbb{R}^4$ 到 $\mathbb{R}^3$ 的线性映射为

$$\mathcal{T}(x_1,x_2,x_3,x_4)=(x_1-x_2+x_3,x_1-x_3+x_4,x_2+x_3+x_4)$$

求 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 和 $\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 的一组基和维数.

2.29 已知 $\mathbb{P}[t]_3$ 中的两组基为：

(I)：$f_1(t)=1+2t^2,f_2(t)=t+2t^2,f_3(t)=1+2t+5t^2$；

(II)：$g_1(t)=1-t,g_2(t)=1+t^2,g_3(t)=t+2t^2$.

线性变换$\mathcal{T}$满足

$$\mathcal{T}(g_1(t))=2+t^2,\mathcal{T}(g_2(t))=t,\mathcal{T}(g_3(t))=1+t+t^2$$

求:(1)$\boldsymbol{\mathcal{T}}$在基 (I) 下的矩阵 $\boldsymbol{A}$;

(2)对于 $f(t)=3+2t+t^2$,求 $\boldsymbol{\mathcal{T}}(f(t))$.

2.30 已知 $\mathbb{P}[t]_3$ 中的任意多项式 $f(t)=a_0+a_1t+a_2t^2$ 在$\boldsymbol{\mathcal{T}}$下的像为

$$\boldsymbol{\mathcal{T}}(f(t))=(a_0-a_1)+(a_1-a_2)t+(a_2-a_0)t^2$$

(1)求 $\mathrm{Ker}(\boldsymbol{\mathcal{T}})$ 和 $\mathrm{Im}(\boldsymbol{\mathcal{T}})$ 的一组基和维数;

(2)是否存在 $\mathbb{P}[t]_3$ 的一组基,使得 T 在该基下的矩阵为对角矩阵?

2.31 已知 2 维线性空间 V 中,基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 到基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ -1 & 2\end{pmatrix}$,线性变换$\boldsymbol{\mathcal{T}}$满足:

$$\boldsymbol{\mathcal{T}}(\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2)=\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2,\quad \boldsymbol{\mathcal{T}}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2)=\boldsymbol{\beta}_1-\boldsymbol{\beta}_2$$

求:(1) $\boldsymbol{\mathcal{T}}$在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 下的矩阵 $\boldsymbol{A}$;

(2) $\boldsymbol{\mathcal{T}}(\boldsymbol{\beta}_1)$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 下的坐标向量.

2.32 证明线性变换 T 的不变子空间的交与和仍然是 T 的不变子空间.

2.33 设 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_1$ 和 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_2$ 是线性空间 V 上的两个**可交换**的线性变换,即 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_1\boldsymbol{\mathcal{T}}_2=\boldsymbol{\mathcal{T}}_2\boldsymbol{\mathcal{T}}_1$. 证明:

(1) $\boldsymbol{\mathcal{T}}_1$ 的特征值子空间 V_λ 是 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_2$ 的不变子空间;

(2) $\boldsymbol{\mathcal{T}}_1$ 与 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_2$ 在 V 中有公共特征向量;

(3) $N(\boldsymbol{\mathcal{T}}_2)$ 和 $R(\boldsymbol{\mathcal{T}}_2)$ 都是 $\boldsymbol{\mathcal{T}}_1$ 的不变子空间.

2.34 求 $\mathbb{R}^3$ 中矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3 & 0 & 1\\ 2 & 2 & 2\\ 1 & 0 & 3\end{pmatrix}$ 所对应的线性变换$\boldsymbol{\mathcal{T}}$的所有非平凡不变子空间.

2.35 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}$ 和 Jordan 变换矩阵 $\boldsymbol{P}$,其中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分别为:

(1) $\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ -2 & -2 & -1\end{pmatrix}$;　(2) $\begin{pmatrix}13 & 16 & 16\\ -5 & -7 & -6\\ -6 & -8 & -7\end{pmatrix}$;

(3) $\begin{pmatrix}4 & 5 & -2\\ -2 & -2 & 1\\ -1 & -1 & 1\end{pmatrix}$;　(4) $\begin{pmatrix}1 & 1 & -1\\ -3 & -3 & 3\\ -2 & -2 & 2\end{pmatrix}$.

2.36 设 $\boldsymbol{A}_1=\begin{pmatrix}1 & 1\\ -4 & -3\end{pmatrix}$,$\boldsymbol{A}_2=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 2 & 0 & -1\end{pmatrix}$,求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_1 & \\ & \boldsymbol{A}_2\end{pmatrix}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}$.

2.37 利用矩阵的标准型求解线性微分方程组 $\begin{cases}x_1'(t)=3x_1+x_2-x_3,\\ x_2'(t)=-2x_1+2x_3,\\ x_3'(t)=-x_1-x_2+3x_3.\end{cases}$

2.38 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-4 & 1 & 4\\ -12 & 4 & 8\\ -6 & 1 & 6\end{pmatrix}$ 的所有 Jordan 链.

2.39　证明方阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 有相同的标准型.

2.40　已知 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & -1 & -2\\ -1 & 2 & 2\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$，求 $g(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^8-9\boldsymbol{A}^6+\boldsymbol{A}^4-3\boldsymbol{A}^3+4\boldsymbol{A}^2-\boldsymbol{I}$.

2.41　利用 Cayley-Hamilton 定理证明：任意可逆矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 都可以表示为 $\boldsymbol{A}$ 的多项式.

2.42　求习题 2.38 和习题 2.40 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式.

第3章 内积空间

“抽象不能单独起作用. 在几何富有成果的科学思维中,直觉和抽象是交互为用的.” “用几何语言代替代数语言几乎总能做到相当的简化,并使掩埋在一大堆错综复杂计算中未被察觉的性质显现出来.” 事实上,解析几何的成功就在于数与形的统一,即将几何上的图形与代数上的数结合了起来. 在线性空间中,只涉及了向量的线性运算. 可是在作为线性空间具体模型的向量空间中,还涉及向量的长度、夹角等度量性质,它们在解决几何问题时起着关键作用,因此必须把度量的概念引入到线性空间中来,以实现代数与几何的完美结合.

3.1 从向量空间 $\mathbb{R}^n$ 到欧氏空间 $\mathbb{R}^n$

3.1.1 从向量的内积说起

一般而言,我们知道,现实世界是 3 维向量空间 $\mathbb{R}^3$. 在高等数学中,我们定义了点积以后, $\mathbb{R}^3$ 中的向量不仅有了长度(模),还有了两向量之间的夹角. 特别是有了垂直概念后,我们可建立空间直角坐标系,从而通过解析几何方法得到了许多优美的结果. 自然地,我们希望把这些东西推广到一般的 n 维向量空间 $\mathbb{R}^n$,使得几何上的 n 维向量也具有一些代数度量性质.

将 3 维空间中的点积推广到 n 维向量空间 $\mathbb{R}^n$,就是向量的内积.

定义 3.1.1 对于 $\mathbb{R}^n$ 中的两个 n 维向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$,称实数

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_ny_n$$

为 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的**内积**(inner product),也称为 $\mathbb{R}^n$ 的**标准内积**.

注意,$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 有时也表示列向量依次为 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的矩阵,因此其具体含义请读者参考上下文来理解. 另外,$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 与 (x,y) 的含义也不同,后者一般表示 $\mathbb{R}^2$ 中的点,或者维数为 2 的行向量.

为了区别于向量空间 $\mathbb{R}^n$,我们称带标准内积的向量空间 $\mathbb{R}^n$ 为**欧氏空间**(Euclidean space) $\mathbb{R}^n$.

由内积的定义可知

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=(x_1,x_2,\cdots,x_n)\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\\vdots\\y_n\end{pmatrix}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\\vdots\\x_n\end{pmatrix}$$

写成矩阵记号形式,即

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) \tag{3.1.1}$$

也就是说,矩阵乘法中的"行乘列法则",其实就是左边矩阵的行向量与右边矩阵的列向量进行内积运算.

定理 3.1.1 对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^n$ 及任意 $k\in\mathbb{R}$,欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 中的标准内积具有下列性质:

(E1)对称性:$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})$;

(E2)双线性性:

(E2a) $(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{z})$, $(k\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$;

(E2b) $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$, $(\boldsymbol{x},k\boldsymbol{y})=k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$;

(E3)正性:当 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 时, $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})>0$;

(E4)定性:$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$.

显然,双线性性使得内积所表示的实数具有与线性变换类似的线性性,因此我们称性质(E2a)为左线性性,(E2b)为右线性性. 根据性质(E1),显然可以从左线性性推出右线性性.

内积还具有一个非常重要的性质,即 Cauchy-Schwarz 不等式.

定理 3.1.2 (Cauchy-Schwarz 不等式)对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$, 恒有

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})^2\leqslant(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}) \tag{3.1.2}$$

用坐标形式来表示,即为

$$(x_1y_1+x_2y_2+\cdots+x_ny_n)^2\leqslant(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2)(y_1^2+y_2^2+\cdots+y_n^2)$$

证明:对任意 $\lambda\in\mathbb{R}$, 有

$$0\leqslant(\boldsymbol{x}+\lambda\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}+\lambda\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})+2\lambda(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+\lambda^2(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$$

这个关于 λ 的首项系数为 $(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$ 的一元二次不等式成立的充要条件是 $\Delta\geqslant 0$, 即

$$4(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})^2-4(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})\leqslant 0$$

当 $\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}$ 时,取 $\lambda=-\dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})}$, 代入上式,整理后即知等号成立. 证毕.

在 $\mathbb{R}$ 中,实数 a 的长度即为绝对值 $|a|=\sqrt{a\cdot a}$;在 $\mathbb{R}^2$ 中,点 $P(a,b)$ 到原点的距离即向量 $\overrightarrow{OP}=(a,b)$ 的长度为 $|\overrightarrow{OP}|=\sqrt{a^2+b^2}$;在 $\mathbb{R}^3$ 中,向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$ 的长度为

$$\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}=\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}$$

推广到 $\mathbb{R}^n$，则 n 维向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$ 的**长度**或**范数**(norm)可定义为

$$\|\boldsymbol{x}\|\equiv\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}=\sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})}\tag{3.1.3}$$

特别地，称 $\|\boldsymbol{x}\|=1$ 的 n 维向量 $\boldsymbol{x}$ 为 n 维**单位向量**(unit vector). 显然，$\|\boldsymbol{x}\|$ 为 $\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$ 的映射.

任意 n 维非零向量 $\boldsymbol{x}$，经过规范化或单位化后，显然可得到相应的单位向量.

Matlab 提供了内置函数 norm，可用于计算向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 的长度，其调用格式为

```
norm(x)
```

$\mathbb{R}^n$ 中的长度或范数具有下列性质：

定理 3.1.3　对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$ 及任意 $\lambda\in\mathbb{R}$，有：

(1)正定性：$\|\boldsymbol{x}\|\geqslant 0$ 且 $\|\boldsymbol{x}\|=0\Leftrightarrow\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$；

(2)正齐性：$\|\lambda\boldsymbol{x}\|=|\lambda|\cdot\|\boldsymbol{x}\|$；

(3)三角不等式：$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$.

证明：从几何上看，这几个性质是一目了然的. 我们只给出三角不等式的证明.

由 Cauchy-Schwarz 不等式 (3.1.2) 可知，$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\leqslant\|\boldsymbol{x}\|\cdot\|\boldsymbol{y}\|$，因此

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2&=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})+2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\\&\leqslant\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+2\|\boldsymbol{x}\|\cdot\|\boldsymbol{y}\|=(\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|)^2\end{aligned}$$

此即 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$. 显然，当 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 同向时，等号成立. 证毕.

对于任意的非零向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$，由 Cauchy-Schwarz 不等式 (3.1.2) 可知 $\left|\dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{\|\boldsymbol{x}\|\cdot\|\boldsymbol{y}\|}\right|\leqslant 1$，因此，类似于高等数学，我们称 $\theta=\arccos\dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{\|\boldsymbol{x}\|\cdot\|\boldsymbol{y}\|}$ ($\theta\in[0,\pi]$)为 n 维非零向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的**夹角**(angle). 特别地，当 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0$ 时，称 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ **正交**(orthogonal)或**垂直**(perpendicular)，记为 $\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$. 显然内积的性质(E1)保证了两向量的夹角与它们的顺序无关.

关于长度，平面几何中最著名的莫过于勾股定理. 与之类似，范数具有平行四边形公式：

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2+\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=2\|\boldsymbol{x}\|^2+2\|\boldsymbol{y}\|^2\tag{3.1.4}$$

这里，$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|$，$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$ 分别是以 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 为邻边的平行四边形的两条对角线的长.

证明：

$$\begin{aligned}\text{左边}&=(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\&=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})+2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})+(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})-2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\\&=2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})+2(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})=2\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2=\text{右边}\end{aligned}$$

特别地，当 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$ 即 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=0$ 时即得勾股定理

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2$$

证毕.

3.1.2　欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的标准正交基

从上一小节可知，欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 具有许多优美的性质，可谓“恩宠之极”. 让我们再接

再厉，将 3 维欧氏空间 $\mathbb{R}^3$ 的直角坐标系推广到 n 维欧氏空间 $\mathbb{R}^n$.

我们知道，欧氏空间 $\mathbb{R}^3$ 的标准基 $\boldsymbol{e}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{e}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{e}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$ 两两互相垂直，并且都是单位向量，因此是 $\mathbb{R}^3$ 的一个标准正交基. 而且有

$$\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=x_1\boldsymbol{e}_1+x_2\boldsymbol{e}_2+x_3\boldsymbol{e}_3=(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3)\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$$

即**向量的坐标分量即为对应的坐标！** 难怪上天如此偏爱地球这个三维欧氏空间.

换一组新基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 又如何？向量 $\boldsymbol{x}$ 在此基下的坐标向量 $\boldsymbol{y}$ 是否也是其分量呢？由式 (2.1.4) 可知，$\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)^{-1}(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3)\boldsymbol{x}\equiv\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{x}$. 答案是 No!

可是我们为什么会有如此想法呢？因为我们希望能够比较方便地从 $\boldsymbol{x}$ 计算出坐标 $\boldsymbol{y}$.

从内积的观点看，对任意 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^3$，显然，$x_1$ 就是 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{e}_1$ 上的投影向量的代数长度（即带正负号的长度），从而有

$$x_1=\|\boldsymbol{x}\|\cos(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)=\|\boldsymbol{x}\|\frac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)}{\|\boldsymbol{x}\|\cdot\|\boldsymbol{e}_1\|}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)$$

类似地，$x_2=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2),x_3=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_3)$，因此向量 $\boldsymbol{x}$ 可分解为

$$\boldsymbol{x}=x_1\boldsymbol{e}_1+x_2\boldsymbol{e}_2+x_3\boldsymbol{e}_3=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2)\boldsymbol{e}_2+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_3)\boldsymbol{e}_3$$

一般地，n 维向量组 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_n$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的一组基，同时也两两正交，并且都是单位向量. 因为显然有 $(\boldsymbol{e}_s,\boldsymbol{e}_t)=\delta_{st}(s,t=1,2,\cdots,n)$，且对任意 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$，也有

$$x_s=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_s)\quad(s=1,2,\cdots,n)$$

故类似可得

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2)\boldsymbol{e}_2+\cdots+(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_n)\boldsymbol{e}_n\tag{3.1.5}$$

即向量 $\boldsymbol{x}$ 也分解成了它在标准正交基的各个基向量 $\boldsymbol{e}_s$ 上的投影向量 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_s)\boldsymbol{e}_s$ 之和. 我们称式 (3.1.5) 为 $\boldsymbol{x}$ 的**正交分解**(orthogonal decomposition).

定义 3.1.2 如果欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组基两两正交，就称之为 $\mathbb{R}^n$ 的一组**正交基**(orthogonal base). 如果此正交基的每个基向量又都是单位向量，则称之为 $\mathbb{R}^n$ 的一组**标准正交基**(normal orthogonal base 或 orthonormal basis).

显然，$\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_n$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的一组标准正交基，称为欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的**自然基**(natural base).

例 3.1.1 已知 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(1,0,-1)^{\mathrm{T}}$，求 $\boldsymbol{\alpha}_3$，使 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 为 $\mathbb{R}^3$ 的一组正交基.

解：显然 $\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_2=0$，即 $\boldsymbol{\alpha}_1\perp\boldsymbol{\alpha}_2$. 由于还要求 $\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_3=0$，故令 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}$，则问题变成解方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\\\boldsymbol{\alpha}_2^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&1&1\\1&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\boldsymbol{0}$$

解得基础解系 $\boldsymbol{\xi}=(1,-2,1)^{\mathrm{T}}$. 取 $\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\xi}=(1,-2,1)^{\mathrm{T}}$，验证后即为所求.

从标准正交基的定义看，有三个要件：

(1)它是向量个数与维数相等的线性无关的向量组；

(2)它是两两正交的向量组(称为**正交向量组**)；

(3)它的每个基向量都为单位向量.

三要件互相之间是否有重叠呢？具体地说，向量组的正交性与线性无关性有什么联系呢？注意到两向量线性无关即不共线，也就是夹角不为0或 π，这自然也包括特殊的垂直，因此正交性是特殊的线性无关性. 一般地，我们有下面的定理.

定理 3.1.4　若欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 中的向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 是正交向量组(两两正交)，并且其中没有零向量，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 必线性无关.

证明：设有 $k_1,k_2,\cdots,k_r$ 使 $k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_r\boldsymbol{\alpha}_r=0$，以 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}(i=1,2,\cdots,r)$ 左乘上式两端，得 $k_1\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_r\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_r=0$，由于 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j=\delta_{ij}(i,j=1,2,\cdots,r)$，因此 $k_i\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_i=0$. 注意到 $\boldsymbol{\alpha}_i\neq\mathbf{0}$，即 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_i=\|\boldsymbol{\alpha}_i\|^2\neq 0$，故得 $k_i=0\ (i=1,2,\cdots,r)$，即 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 线性无关. 证毕.

因为定理3.1.4的逆命题不成立，所以我们自然会问：一个线性无关组，在“拉齐了队伍”，成为一组基之后，如何“更上一层楼”，成为一组标准正交基？

根据定理3.1.4，标准正交基只剩下两个要件：

(1)标准正交基是向量个数与维数相等的正交向量组；

(2)标准正交基是每个向量都是单位向量的向量组.

其中第一个要件即正交性，显然很不容易达到. 那么如何将一组基改造成为正交基呢？

设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组基，$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 是我们希望得到的正交基. 显然，可令 $\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1$. 问题是如何得到 $\boldsymbol{\beta}_2$ 呢？

联想到向量的正交分解式(3.1.5)，将 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 正交分解为 $\boldsymbol{\alpha}_2=k\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{r}_1$，如图3-1(a)所示，并考查残差向量 $\boldsymbol{r}_1$，也就是向量 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 在 $\boldsymbol{\beta}_1$ 上做正交投影后的残差向量 $\boldsymbol{r}_1$. 由于 $\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{\alpha}_2-k\boldsymbol{\beta}_1$ 且 $\boldsymbol{r}_1\perp\boldsymbol{\beta}_1$，因此

$$0=(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{\beta}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1)-k(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_1)$$

解得 $k=\dfrac{(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_1)}$. 故可令 $\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{\alpha}_2-\dfrac{(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_1)}\boldsymbol{\beta}_1$，显然此时 $(\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_1)=0$.

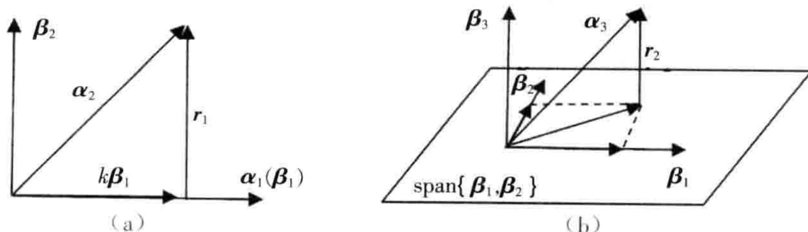


图3-1　利用正交分解构造标准正交基

继续考查 $\boldsymbol{\alpha}_3$ 在 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2$ 所张平面上作正交投影后的残差向量，如图 3－1(b)所示：

$$\boldsymbol{r}_2 \equiv \boldsymbol{\alpha}_3 - k_1\boldsymbol{\beta}_1 - k_2\boldsymbol{\beta}_2,\ \boldsymbol{r}_2 \perp \boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{r}_2 \perp \boldsymbol{\beta}_2$$

由 $(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{\beta}_1)=(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{\beta}_2)=0$，并注意到 $(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)=0$，可求出

$$k_1=\frac{(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_1)},\quad k_2=\frac{(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\beta}_2)}{(\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_2)}$$

故令

$$\boldsymbol{\beta}_3=\boldsymbol{\alpha}_3-\frac{(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_1)}\boldsymbol{\beta}_1-\frac{(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\beta}_2)}{(\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\beta}_2)}\boldsymbol{\beta}_2$$

显然，此时 $(\boldsymbol{\beta}_3,\boldsymbol{\beta}_1)=(\boldsymbol{\beta}_3,\boldsymbol{\beta}_2)=0$.

一般地，对 $j=1,2,3,\cdots,n$，令

$$\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\beta}_j=\boldsymbol{\alpha}_j-\sum_{k=1}^{j-1}\frac{(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\beta}_k)}{(\boldsymbol{\beta}_k,\boldsymbol{\beta}_k)}\boldsymbol{\beta}_k \tag{3.1.6}$$

至此，我们即得在矩阵计算中具有基础性作用的 Gram-Schmidt 正交化方法.

定理 3.1.5 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组基，则按式 (3.1.6) 构造出的 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 就是 $\mathbb{R}^n$ 的正交基.

再将正交基 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 单位化，就得到了 $\mathbb{R}^n$ 的一组标准正交基 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$，即

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\beta}_1}{\|\boldsymbol{\beta}_1\|},\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\beta}_2}{\|\boldsymbol{\beta}_2\|},\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n=\frac{\boldsymbol{\beta}_n}{\|\boldsymbol{\beta}_n\|}$$

回到开始的问题. 若向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 下的坐标向量为 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$，即

$$\boldsymbol{x}=y_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+y_2\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+y_n\boldsymbol{\varepsilon}_n$$

则对 $i=1,2,\cdots,n$，都有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{x})&=(\boldsymbol{\varepsilon}_i,y_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+y_2\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+y_n\boldsymbol{\varepsilon}_n)\\&=y_1(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{\varepsilon}_1)+y_2(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{\varepsilon}_2)+\cdots+y_n(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\\&=y_i(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{\varepsilon}_i)=y_i\end{aligned}$$

即向量的坐标分量仍是该向量与相应基向量的内积。

我们知道，以向量空间 $\mathbb{R}^n$ 的基为列向量的矩阵是可逆的. 那么，以欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的标准正交基为列向量的矩阵会特殊成什么样的可逆矩阵呢？

设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组标准正交基，令 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$，注意到

$$\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j=(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=\delta_{ij}\quad(i,j=1,2,\cdots,n)$$

即

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\\\boldsymbol{\alpha}_2^{\mathrm{T}}\\\vdots\\\boldsymbol{\alpha}_n^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\delta_{ij})$$

也就是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$. 原来矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵！这就是正交矩阵名称的由来.

3.2 QR 分解

QR 分解在矩阵计算中占据相当重要的地位. 利用 QR 分解,可以解决各种应用中(如工程力学、流体力学、图像压缩处理、结构分析等)出现的最小二乘问题、特征值问题等矩阵计算中的核心问题.

3.2.1 再谈 Gram-Schmidt 方法

考查可逆矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 的 Gram-Schmidt 过程. 由 3.1.2 小节可知

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\beta}_1}{\|\boldsymbol{\beta}_1\|}\equiv t_{11}\boldsymbol{\alpha}_1$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\beta}_2}{\|\boldsymbol{\beta}_2\|}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}_2\|}(\boldsymbol{\alpha}_2-k\boldsymbol{\alpha}_1)\equiv t_{22}\boldsymbol{\alpha}_2+t_{12}\boldsymbol{\alpha}_1$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{\boldsymbol{\beta}_3}{\|\boldsymbol{\beta}_3\|}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}_3\|}(\boldsymbol{\alpha}_3-k_1\boldsymbol{\alpha}_1-k_2\boldsymbol{\alpha}_2)\equiv t_{33}\boldsymbol{\alpha}_3+t_{23}\boldsymbol{\alpha}_2+t_{13}\boldsymbol{\alpha}_1$$

一般地,对 $j=1,2,\cdots,n$, 有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_j&=\frac{\boldsymbol{\beta}_j}{\|\boldsymbol{\beta}_j\|}=\frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}_j\|}(\boldsymbol{\alpha}_j-k_1\boldsymbol{\alpha}_1-k_2\boldsymbol{\alpha}_2-\cdots-k_{j-1}\boldsymbol{\alpha}_{j-1})\\&\equiv t_{jj}\boldsymbol{\alpha}_j+t_{j-1,j}\boldsymbol{\alpha}_{j-1}+\cdots+t_{1j}\boldsymbol{\alpha}_1\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

其中, $t_{jj}=\|\boldsymbol{\beta}_j\|^{-1}\neq 0$. 这也就是说,Gram-Schmidt 过程实际上就是逐步扩张正交向量组 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j$, 使得

$$\operatorname{span}(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j)=\operatorname{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_j)\tag{3.2.2}$$

并且成立

$$(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\begin{pmatrix}t_{11}&\cdots&t_{1n}\\&\ddots&\vdots\\&&t_{nn}\end{pmatrix}$$

使用矩阵语言,就是 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{AT}$, 这里 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$, $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)$ 是正交矩阵, $\boldsymbol{T}=(t_{ij})$ 是上三角阵. 由于上三角矩阵的逆矩阵仍然是上三角矩阵,若记 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{T}^{-1}$, 则得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$, 其中上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的对角元 $r_{jj}=\|\boldsymbol{\beta}_j\|\neq 0$, 而

$$r_{ij}=(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})_{ij}=\boldsymbol{\varepsilon}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j=(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\varepsilon}_i)\quad(i,j=1,2,\cdots,n\text{ 且 }i>j)$$

定义 3.2.1 对 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$, 如果存在正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$, 使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}\tag{3.2.3}$$

则称式 (3.2.3) 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的(**完全**)**QR 分解**(full QR decomposition)或**正交三角分解**(orthogonal triangular decomposition).

显然,当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时,线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 变成了 $\boldsymbol{QRx}=\boldsymbol{b}$, 也就是三角方程组

$\boldsymbol{Rx}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$. 这里巧妙地利用$\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$，避开了一般矩阵的求逆问题.

在式(3.1.6)中，注意到

$$\frac{(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\beta}_k)}{(\boldsymbol{\beta}_k,\boldsymbol{\beta}_k)}\boldsymbol{\beta}_k=\left(\boldsymbol{\alpha}_j,\frac{\boldsymbol{\beta}_k}{\sqrt{(\boldsymbol{\beta}_k,\boldsymbol{\beta}_k)}}\right)\frac{\boldsymbol{\beta}_k}{\sqrt{(\boldsymbol{\beta}_k,\boldsymbol{\beta}_k)}}=\left(\boldsymbol{\alpha}_j,\frac{\boldsymbol{\beta}_k}{\|\boldsymbol{\beta}_k\|}\right)\frac{\boldsymbol{\beta}_k}{\|\boldsymbol{\beta}_k\|}$$
$$=(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\varepsilon}_k)\boldsymbol{\varepsilon}_k=r_{kj}\boldsymbol{\varepsilon}_k$$

因此，可得经典的Gram-Schmidt(CGS)算法如下：

(1)令$\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1$，计算$r_{11}=\|\boldsymbol{\beta}_1\|$及$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\boldsymbol{\beta}_1/r_{11}$；

(2)对$j=2,3,\cdots,n$：

①计算$r_{1j},r_{2j},\cdots,r_{j-1,j}$以及$\boldsymbol{\beta}_j=\boldsymbol{\alpha}_j-\sum_{k=1}^{j-1}r_{kj}\boldsymbol{\varepsilon}_k$；

②计算$r_{jj}=\|\boldsymbol{\beta}_j\|$以及$\boldsymbol{\varepsilon}_j=\boldsymbol{\beta}_j/r_{jj}$.

以$n=4$的情形为例，向量产生过程为

$$\boldsymbol{\beta}_1\rightarrow\boldsymbol{\varepsilon}_1\rightarrow\boldsymbol{\beta}_2\rightarrow\boldsymbol{\varepsilon}_2\rightarrow\boldsymbol{\beta}_3\rightarrow\boldsymbol{\varepsilon}_3\rightarrow\boldsymbol{\beta}_4\rightarrow\boldsymbol{\varepsilon}_4$$

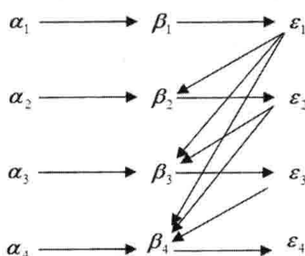


图3-2　CGS算法的向量产生过程

如图3-2所示.

例3.2.1　利用CGS算法求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&-3&1\\2&1&-6\\0&4&2\end{pmatrix}$的完全QR分解.

解：$\boldsymbol{\alpha}_1=(0,2,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1=(0,2,0)^{\mathrm{T}}$，$r_{11}=\|\boldsymbol{\beta}_1\|=2$，$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\beta}_1}{r_{11}}=(0,1,0)^{\mathrm{T}}$；

$r_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=1$，$\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\alpha}_2-r_{12}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(-3,0,4)^{\mathrm{T}}$，$r_{22}=\|\boldsymbol{\beta}_2\|=5$，$\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\beta}_2}{r_{22}}=\frac{1}{5}(-3,0,4)^{\mathrm{T}}$；

$r_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=-6$，$r_{23}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_2)=1$，$\boldsymbol{\beta}_3=\boldsymbol{\alpha}_3-r_{13}\boldsymbol{\varepsilon}_1-r_{23}\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{1}{5}(8,0,6)^{\mathrm{T}}$，$r_{33}=\|\boldsymbol{\beta}_3\|=2$，$\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{\boldsymbol{\beta}_3}{r_{33}}=\frac{1}{5}(4,0,3)^{\mathrm{T}}$.

所以$\boldsymbol{A}$的完全QR分解为：

$$\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_3)=\begin{pmatrix}0&-\frac{3}{5}&\frac{4}{5}\\1&0&0\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\end{pmatrix},\ \boldsymbol{R}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&-6\\0&5&1\\0&0&2\end{pmatrix}\tag{3.2.4}$$

Matlab提供了内置函数qr用于计算$\boldsymbol{A}$的完全QR分解，其调用格式为

```
[Q,R] = qr(A)
```

而ATLAST库中提供的则是gschmidt函数，其中涉及CGS算法的实现代码为

```
R= zeros(n);Q= A;R(1,1)= norm(A(:,1)); Q(:,1)= A(:,1)/R(1,1);
for j= 2:n
```

```
    R(1:j- 1,j)= Q(:,1:j- 1)'* A(:,j);   %合并计算 r1j,r2j,…,rj-1,j
    Q(:,j)= A(:,j)- Q(:,1:j- 1)* R(1:j- 1,j);   %计算 βj
    R(j,j)= norm(Q(:,j));Q(:,j)= Q(:,j)/R(j,j);
end
```

由上述分析可知，$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 是通过不断迭代逐步扩张后得到的，仅当需要计算 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 时，才用到 $\boldsymbol{\alpha}_j$，因此此前不需要改动 $\boldsymbol{\alpha}_j$ 的值．事实上，CGS 算法实质上是一种投影类方法，它将 $\mathbb{R}^n$ 正交投影到空间 $\text{span}\,(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_{j-1})^{\perp}$（关于这个符号的含义请参考 3.4 节）．遗憾的是，CGS 迭代算法在数值上是不稳定的．

幸运的是，对 CGS 算法进行一个简单修正就可以使问题得到改进，这就产生了 MGS（Modified Gram-Schmidt）算法．

MGS 算法的想法是每当产生一个新的 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 后，就重新计算所有的后续向量 $\boldsymbol{\alpha}_{j+1},\boldsymbol{\alpha}_{j+2},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{j+n}$，消去其中包含的 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 成分（即与 $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 平行的分量），从而使这些改变后的后续向量都与已计算出的 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j$ 正交．它实质上也是正交投影类方法，是处理大规模矩阵问题的子空间投影法的基础．

MGS 算法的计算步骤具体如下：

（1）令 $\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1$；

（2）对 $j=1,2,3,\cdots,n$：

①计算 $r_{jj}=\|\boldsymbol{\beta}_j\|$ 以及 $\boldsymbol{\varepsilon}_j=\boldsymbol{\beta}_j/r_{jj}$；

②计算 $r_{j,j+1},r_{j,j+2},\cdots,r_{j,n}$ 以及 $\boldsymbol{\beta}_l=\boldsymbol{\alpha}_l-\sum\limits_{k=1}^{l-1}r_{kj}\boldsymbol{\varepsilon}_k\quad(l=j+1,j+2,\cdots,n)$．

仍以 $n=4$ 的情形为例，向量产生过程如图 3-3 所示．

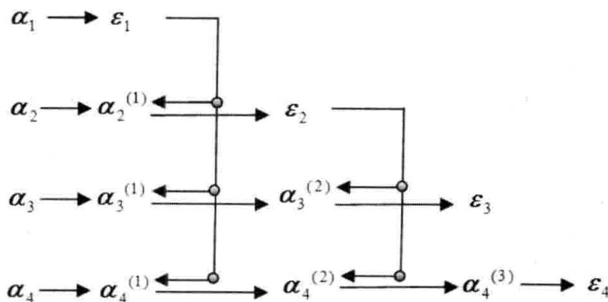


图 3-3　MGS 算法的向量产生过程

例 3.2.2　利用 MGS 算法求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全 QR 分解，其中 $\boldsymbol{A}$ 与例 3.2.1 相同．

解： $r_{11}=\|\boldsymbol{\alpha}_1\|=2,\boldsymbol{\varepsilon}_1=\dfrac{\boldsymbol{\alpha}_1}{r_{11}}=(0,1,0)^{\mathrm{T}}$，$r_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=1,r_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=-6$；

$\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_2-r_{12}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(-3,0,4)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_3-r_{13}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(1,0,2)^{\mathrm{T}}$；

$r_{22}=\|\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}\|=5,\boldsymbol{\varepsilon}_2=\dfrac{\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}}{r_{22}}=\dfrac{1}{5}(-3,0,4)^{\mathrm{T}}$，$r_{23}=(\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)},\boldsymbol{\varepsilon}_2)=1$；

$\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}=\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}-r_{23}\boldsymbol{\varepsilon}_2=\dfrac{1}{5}(8,0,6)^{\mathrm{T}}$，$r_{33}=\|\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\|=2,\boldsymbol{\varepsilon}_3=\dfrac{\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}}{r_{33}}=\dfrac{1}{5}(4,0,3)^{\mathrm{T}}$．

所以 $\boldsymbol{A}$ 的完全 QR 分解也是式（3.2.4）．

在 ATLAST 库中，gschmidt 函数也实现了 MGS 算法，代码如下：

```
R= zeros(n);Q= A;
forj= 1:n;
  R(j,j)= norm(Q(:,j));Q(:,j)= Q(:,j)/R(j,j);
  R(j,j+ 1:n)= Q(:,j)'* Q(:,j+ 1:n); %合并计算 r_{j,j+1},r_{j,j+2},…,r_{j,n}
  Q(:,j+ 1:n)= Q(:,j+ 1:n)- Q(:,j)* R(j,j+ 1:n);
end
```

3.2.2 矩阵的 QR 分解

由式 (3.2.1) 可知，线性无关组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_j$ 也可被改造成正交组 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j$，而且

$$(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_j)\begin{pmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1j} \\ & \ddots & \vdots \\ & & t_{jj} \end{pmatrix}$$

用矩阵表示即为 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{AT}$，这里 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_j)$，$\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_j)$，$\boldsymbol{T}$ 是上三角阵. 若记 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{T}^{-1}$，则形式上仍有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$，其中上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的对角元 $r_{jj}=\|\boldsymbol{\beta}_j\|\neq 0$，非对角元

$$r_{ij}=(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})_{ij}=\boldsymbol{\varepsilon}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j=(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\varepsilon}_i)\quad(i,j=1,2,\cdots,n \text{ 且 } i>j)$$

定义 3.2.2 如果 $m\times n$ 阶的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}_n$ 或 $\boldsymbol{QQ}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_m$，则称矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 为**半正交矩阵**(semi-orthogonal matrix).

显然，半正交的方阵就是正交矩阵. 满足 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}_n$ 的半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，其各列是两两正交的单位列向量，而满足 $\boldsymbol{QQ}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_m$ 的半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，其各行是两两正交的单位行向量，即 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ 的各列是两两正交的单位列向量. 具体使用时，可依上下文来确定这两种半正交矩阵.

定义 3.2.3 对 $m\times n\ (m\geqslant n)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$，如果存在 $m\times n$ 阶的半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ (这里 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$)和上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}\tag{3.2.5}$$

则称式 (3.2.5) 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**约化 QR 分解**(reduced QR decomposition，如图 3-4 所示).

显然，当 $\boldsymbol{A}$ 特殊化为方阵时，式 (3.2.5) 就是式 (3.2.3).

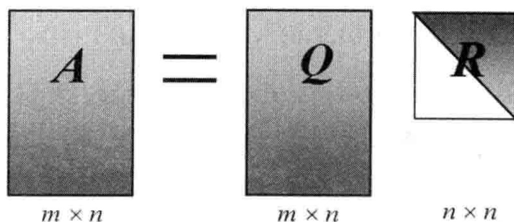


图 3-4 矩阵 A 的约化 QR 分解($m\geqslant n$)

定理 3.2.1　(列满秩阵的约化 QR 分解) 设 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是列满秩阵，则必存在 $m\times n$ 阶半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$（这里 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$）和非奇异上三角方阵 $\boldsymbol{R}$，使得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有约化 QR 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.

推论(可逆阵的完全 QR 分解) 设 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶可逆矩阵，则存在 n 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和非奇异上三角方阵 $\boldsymbol{R}$，使得矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.

例 3.2.3　利用 MGS 算法求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4&2&1\\2&0&1\\2&0&-1\\1&2&1\end{pmatrix}$ 的 QR 分解.

解：设 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$，令 $r_{11}=\|\boldsymbol{\alpha}_1\|=5$，则

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\alpha}_1}{r_{11}}=(0.8,0.4,0.4,0.2)^{\mathrm{T}},\ r_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=2, r_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=1;$$

$$\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_2-r_{12}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(0.4,-0.8,-0.8,1.6)^{\mathrm{T}};$$

$$\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_3-r_{13}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(0.2,0.6,-1.4,0.8)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{22}=\|\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}\|=2, \boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}}{r_{22}}=(0.2,-0.4,-0.4,0.8)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{23}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_2)=1,\ \boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}=\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}-r_{23}\boldsymbol{\varepsilon}_2=(0,1,-1,0)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{33}=\|\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\|=\sqrt{2}, \boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}}{r_{33}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,-1,0)^{\mathrm{T}}.$$

综上可知 $\boldsymbol{A}$ 的约化 QR 分解为

$$\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_3)=\begin{pmatrix}0.8&0.2&0\\0.4&-0.4&\sqrt{2}/2\\0.4&-0.4&-\sqrt{2}/2\\0.2&0.8&0\end{pmatrix}, \boldsymbol{R}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}5&2&1\\0&2&1\\0&0&\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

例 3.2.4　求列空间 $R(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&2\\1&2&3\\1&2&1\\1&1&6\end{pmatrix}$.

解法一：CGS 算法.

设 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$，令

$$\boldsymbol{\beta}_1=\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,1,1)^{\mathrm{T}},\ r_{11}=\|\boldsymbol{\beta}_1\|=2, \boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\beta}_1}{r_{11}}=\frac{1}{2}(1,1,1,1)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=3, \boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\alpha}_2-r_{12}\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{1}{2}(-1,1,1,-1)^{\mathrm{T}},$$

$$r_{22}=\|\boldsymbol{\beta}_2\|=1, \boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\beta}_2}{r_{22}}=\frac{1}{2}(-1,1,1,-1)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=6, r_{23}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_2)=-2,$$

$$\boldsymbol{\beta}_3=\boldsymbol{\alpha}_3-r_{13}\boldsymbol{\varepsilon}_1-r_{23}\boldsymbol{\varepsilon}_2=(-2,1,-1,2)^{\mathrm{T}},$$

$$r_{33}=\|\boldsymbol{\beta}_3\|=\sqrt{10},\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{\boldsymbol{\beta}_3}{r_{33}}=\frac{1}{\sqrt{10}}(-2,1,-1,2)^{\mathrm{T}}.$$

$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_3$ 即为 $R(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基.

解法二:MGS 算法.

设 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$，令 $r_{11}=\|\boldsymbol{\alpha}_1\|=2$，则

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{\boldsymbol{\alpha}_1}{r_{11}}=\frac{1}{2}(1,1,1,1)^{\mathrm{T}},\ r_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=3,r_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_1)=6;$$

$$\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_2-r_{12}\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{1}{2}(-1,1,1,-1)^{\mathrm{T}},$$

$$\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}=\boldsymbol{\alpha}_3-r_{13}\boldsymbol{\varepsilon}_1=(-1,0,-2,3)^{\mathrm{T}},$$

$$r_{22}=\|\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}\|=1,\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{\boldsymbol{\alpha}_2^{(1)}}{r_{22}}=\frac{1}{2}(-1,1,1,-1)^{\mathrm{T}},$$

$$r_{23}=(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\varepsilon}_2)=-2,\ \boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}=\boldsymbol{\alpha}_3^{(1)}-r_{23}\boldsymbol{\varepsilon}_2=(0,-1,-3,4)^{\mathrm{T}};$$

$$r_{33}=\|\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}\|=\sqrt{10},\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{\boldsymbol{\alpha}_3^{(2)}}{r_{33}}=\frac{1}{\sqrt{10}}(-2,1,-1,2)^{\mathrm{T}}.$$

结果与解法一相同.

在 Matlab 中,提供了内置函数 orth 可用于求 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 $R(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基,其调用格式为

```
Q= orth(A)
```

其中,返回的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 是 $m\times r$ 阶半正交矩阵,且 $r=r(\boldsymbol{A})$.

对列满秩的长方阵,其实也存在形式上的完全 QR 分解(见图 3-5).

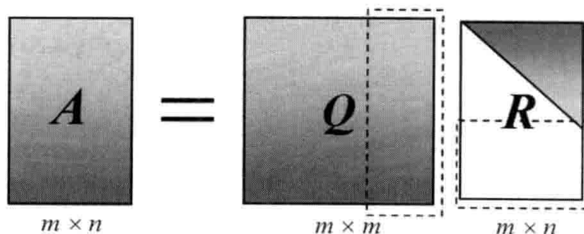


图 3-5 矩阵 A 的完全 QR 分解($m\geqslant n$)

定理 3.2.2 设 $m\times n\ (m\geqslant n)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是列满秩阵,则必存在 m 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 n 阶非奇异上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，使得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有完全 QR 分解

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}\tag{3.2.6}$$

证明: 由定理 3.2.1 可知,存在 $m\times n$ 阶半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}_1=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n)$ 和 n 阶非奇异上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}$. 根据基的扩张定理,显然正交向量组 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n$ 可扩充为 $\mathbb{R}^m$ 的标准正交基 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n,\boldsymbol{q}_{n+1},\boldsymbol{q}_{n+2},\cdots,\boldsymbol{q}_m$. 令 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m)$，$\boldsymbol{Q}_2=(\boldsymbol{q}_{n+1},\boldsymbol{q}_{n+2},\cdots,\boldsymbol{q}_m)$，则有

$$A = Q_1R = Q_1R + Q_2O = (Q_1, Q_2)\begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix} = Q\begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}.$$

证毕.

显然,在式(3.2.6)中只选取Q的前n列,组成半正交矩阵Q_1,即得同一个矩阵A的约化QR分解$A = Q_1R$,因此约化QR分解也被称为矩阵A的经济型QR分解.当然"便宜没好货",此时的Q_1不是方阵,不能直接求逆.因此实际使用时选择何种分解,需视具体情形而定.另外,有的书中也宽泛地称矩阵$\begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}$为上三角矩阵.

例如,例3.2.3中的矩阵A就具有如下的完全QR分解:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 & 0 & -4\sqrt{2}/10 \\ 0.4 & -0.4 & \sqrt{2}/2 & 3\sqrt{2}/10 \\ 0.4 & -0.4 & -\sqrt{2}/2 & 3\sqrt{2}/10 \\ 0.2 & 0.8 & 0 & 4\sqrt{2}/10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

事实上,如果给列满秩矩阵A补上单元列,就可将结果扩充为方阵的QR分解,即

$$(A, e_4) = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 & 0 & -4\sqrt{2}/10 \\ 0.4 & -0.4 & \sqrt{2}/2 & 3\sqrt{2}/10 \\ 0.4 & -0.4 & -\sqrt{2}/2 & 3\sqrt{2}/10 \\ 0.2 & 0.8 & 0 & 4\sqrt{2}/10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 & 0.2 \\ 0 & 2 & 1 & 0.8 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4\sqrt{2}/10 \end{pmatrix}$$

对行满秩的长方阵,按照类似的"扩充"、"补零"措施,是否存在类似的QR分解呢?

命题 3.2.1　设$m \times n\ (m \leqslant n)$阶矩阵$A$是行满秩阵,则必存在$m$阶正交矩阵$Q$和$m$阶非奇异上三角矩阵$R$,使得矩阵$A$具有完全QR分解

$$A = Q(R, O) \tag{3.2.7}$$

亲爱的读者,请你来判断这个命题的真伪吧.进一步地,如果这是个错误的命题,那又该如何修改,使得其正确呢?

既然列满秩矩阵可以通过"扩充"、"补零"得到QR分解,那么,对任意矩阵,是否也可以如法炮制呢?

定理 3.2.3　**(QR分解)**设A是$m \times n$阶矩阵,且其秩为$r(A) = r > 0$,则必存在m阶正交矩阵Q和$r \times n$阶行满秩矩阵R,使得矩阵A具有完全QR分解$A = Q\begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}$和约化QR分解$A = Q_1R$,这里$Q_1$是$Q$的前$r$列构成的半正交矩阵.

证明:由式(1.2.11)可知,A存在满秩分解,即存在$m \times r$阶列满秩矩阵B和$r \times n$阶行满秩矩阵C,使得$A = BC$.而对矩阵B,根据定理3.2.3,又存在m阶正交矩阵Q和

r 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{R}_1$，使得 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}_1\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}$，因此 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}_1\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}\boldsymbol{C}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{C}\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}$，其中 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{C}$ 为 $r\times n$ 阶行满秩矩阵. 作列分块 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2)$，这里 $\boldsymbol{Q}_1$ 是 $m\times r$ 阶半正交矩阵，$\boldsymbol{Q}_2$ 是 $m\times(m-r)$ 阶半正交矩阵，则

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\\boldsymbol{O}\end{bmatrix}=(\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2)\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\\boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}+\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{O}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}$$

证毕.

例 3.2.5 **(Gram-Schmidt 正交化过程能否用于非列满秩阵)**将 MGS 算法用于非列满秩阵，得到的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 未必是列正交矩阵，比如对矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&1\\0&0&1\\1&2&1\end{pmatrix}$，得到的分解式为

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&1\\0&0&1\\1&2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0\\0&0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2}&2\sqrt{2}&\sqrt{2}\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\boldsymbol{QR}$$

其中的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 不是正交矩阵. 但观察可发现，只要将 $\boldsymbol{Q}$ 修改为 $\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\end{pmatrix}$，即可得到非列满秩矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解.

在 Matlab 中，调用格式

```
[Q,R] = qr(A)
```

返回的是 m 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{R}$，且 $m>n$ 时 $\boldsymbol{R}$ 为上三角矩阵，$m\leqslant n$ 时 $\boldsymbol{R}$ 为行满秩矩阵. 另一种调用格式为

```
[Q,R] = qr(A,0)
```

当 $m>n$ 时返回的是 $m\times n$ 阶列正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 n 阶上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$（注意这个结果未必是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的约化 QR 分解），当 $m\leqslant n$ 时则与前一种调用格式的结果相同.

3.3 欧氏空间及其标准正交基

向量空间中向量的长度与夹角是用内积定义的，引入这些度量后的线性空间，自然就推广为内积空间. 在内积空间内引入标准正交基后，向量的内积运算就转化成了我们熟悉的向量空间的内积运算. 在矩阵计算和微分方程数值解等学科中，许多重要的算法

都与正交性有密切联系，因此正交的重要性，无论怎么强调都不过分.

3.3.1 欧氏空间

注意到内积是从两个向量得到的一个数，按照公理化的精神和要求，我们自然希望通过确定这种运算的一些性质，从而给出线性空间中内积的公理化定义.

欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 中内积的性质前已述及. 研究发现，我们只需选择其中的部分性质作为公理.

定义 3.3.1　设 V 是实数域 $\mathbb{R}$ 上的线性空间. 如果对 V 中任意两个向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，按照某种对应规则，都存在唯一的实数 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})\in\mathbb{R}$ 与之对应，并且这种对应规则还满足以下四个条件：

(1)对称性：对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})$；

(2)齐次性：对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$ 和任意 $\lambda\in\mathbb{R}$，都有 $(\lambda\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\lambda(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$；

(3)可加性：对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}\in V$，都有 $(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})+(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})$；

(4)正定性：对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$，都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})\geqslant 0$，当且仅当 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$ 时，等号成立.

则称 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的**内积**，称定义了内积的线性空间 V 为**实内积空间**(real inner product space)，也称**欧氏空间**.

几点注意：

(1)齐次性和可加性合称为内积的双线性性；

(2)从定义可知，内积实际上是一种映射(或者**双线性函数**)，即 $(\cdot,\cdot):V\times V\mapsto\mathbb{R}$. 这样同一个线性空间显然可定义多种内积；

(3)欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 仅仅是一种特殊的欧氏空间；

(4)由于向量的内积与向量的线性运算无关，所以欧氏空间 V 实际上是特殊的线性空间 V，即定义了内积的线性空间.

例 3.3.1　考虑无穷实数数列的集合 $\mathbb{H}=\{\boldsymbol{\alpha}\mid\boldsymbol{\alpha}=(a_1,a_2,\cdots)^{\mathrm{T}}\}$. 对任意

$$\boldsymbol{\alpha}=(a_1,a_2,\cdots)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}=(b_1,b_2,\cdots)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{H}$$

规定

$$\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}=(a_1+b_1,a_2+b_2,\cdots)^{\mathrm{T}},k\boldsymbol{\alpha}=(ka_1,ka_2,\cdots)^{\mathrm{T}}$$

验证可知，$\mathbb{H}$对上述运算构成线性空间.

类比欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 可知，$\mathbb{H}$ 中的内积 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 应"形式上"定义为

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}=a_1b_1+a_2b_2+\cdots=\sum_{n=1}^{\infty}a_nb_n \tag{3.3.1}$$

显然，必须保证此级数收敛. 特别地，级数 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})=\sum\limits_{n=1}^{\infty}a_n^2$ 也要收敛，记为 $\sum\limits_{n=1}^{\infty}a_n^2<+\infty$. 简单验算可知上述内积定义满足定义 3.3.1，此时的欧氏空间被称为**希尔伯特空间**，记为 $\mathbb{H}^2$，即 $\mathbb{H}^2$ 是所有平方和收敛的实数列的集合，也就是说

$$\mathbb{H}^2\equiv\{\boldsymbol{\alpha}\mid\boldsymbol{\alpha}=(a_1,a_2,\cdots,a_n,\cdots)^{\mathrm{T}},\sum_{i=1}^{\infty}a_i^2<+\infty\}$$

另外，注意到欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 的标准内积与二次型类似，因此也可有如下推广：

例 3.3.2 在向量空间 $\mathbb{R}^n$ 中，对任意 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ 和实对称矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{SR}^{n\times n}$，定义**实双线性型**(Bilinear Form)为

$$[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}] \equiv (\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax} \tag{3.3.2}$$

容易验证 $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的一个内积，一般称之为 **$\boldsymbol{A}$ 内积**，也记为 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})_{\boldsymbol{A}}$.

特别地，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ 时 $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}] = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}$ 就是二次型；当 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$ 时就是 $\mathbb{R}^n$ 的标准内积.

由于函数也可以看成向量，所以内积也可以推广到函数. 先考虑折线函数：

$$\boldsymbol{F} \equiv \{\boldsymbol{f} \mid \boldsymbol{f} = (f_1,f_2,\cdots,f_n)^{\mathrm{T}}\}$$

对任意 $\boldsymbol{f},\boldsymbol{g} \in \boldsymbol{F}$，显然其内积可“形式地”定义为

$$(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g}) = f_1g_1 + f_2g_2 + \cdots f_ng_n = \sum_{i=1}^{n} f_ig_i$$

如果将一般函数看成具有无穷段折线段的向量，此时上面的内积定义又会变成什么形式呢？这里涉及函数的无限求和……对，无限求和即积分！

例 3.3.3 对任意 f、$g \in \mathbb{C}[a,b]$，容易验证映射

$$(f,g) \equiv \int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x \tag{3.3.3}$$

是 $\mathbb{C}[a,b]$ 的一个内积，称为**函数空间 $\mathbb{C}[a,b]$ 的标准内积.**

证明: 仅给出正定性中定性的证明. 当 $(f,f) \equiv \int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x = 0$ 时，若有 $f(c) \neq 0$，$c \in (a,b)$，则由函数的连续性，存在邻域 $N(c,\delta)$，使得其内任意点 x 的函数值都满足 $f^2(x) > 0$，从而

$$(f,f) = \int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x = \int_{c-\delta}^{c+\delta} f^2(x)\mathrm{d}x > 0$$

与 $(f,f) = 0$ 矛盾. 证毕.

多项式是特殊的连续函数，因此对任意多项式 f、$g \in \mathbb{P}[x]_n$，式 (3.3.3) 也是 $\mathbb{P}[x]_n$ 的一个内积，称为**多项式空间 $\mathbb{P}[x]_n$ 的标准内积.** 类似地，对任意多项式 f、$g \in \mathbb{P}[x]$，式 (3.3.3) 也是多项式空间 $\mathbb{P}[x]$ 的标准内积.

例 3.3.4 已知多项式空间 $\mathbb{P}[t]_3$ 的一个内积为

$$(f,g) = \int_{-1}^{1} f(t)g(t)\mathrm{d}t,\ f,g \in \mathbb{P}[t]_3$$

试计算下列函数的内积：$f(t) = 1 - t + t^2$，$g(t) = 1 - 4t - 5t^2$.

解:
$$\begin{aligned}(f,g) &= \int_{-1}^{1} (1 - t + t^2)(1 - 4t - 5t^2)\mathrm{d}t \\ &= \int_{-1}^{1} (1 - 5t - 4t^3 - 5t^4)\mathrm{d}t = 2\int_0^1 (1 - 5t^4)\mathrm{d}t = 0.\end{aligned}$$

类似地，将矩阵看成由行向量依次连接而成的一个超级向量，即可得 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的内积

定义.

例 3.3.5　在矩阵空间 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 中,对任意 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{m\times n}$,定义

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})\equiv\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}b_{ij}=\operatorname{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})=\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})\tag{3.3.4}$$

验算可知,它是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的一个内积,称为**矩阵空间 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的标准内积.**

注意式(3.3.4)中涉及矩阵迹的两个性质:

(1)对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$,有 $\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=\operatorname{tr}(\boldsymbol{A})$;

(2)对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 及 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times m}$,有 $\operatorname{tr}(\boldsymbol{AB})=\operatorname{tr}(\boldsymbol{BA})$.

在欧氏空间 V 中,Cauchy-Schwarz 不等式也是成立的.其证明与定理 3.1.2 完全相同.

定理 3.3.1　**(Cauchy-Schwarz 不等式)**对欧氏空间 V 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$,恒有

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})^2\leqslant(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})\tag{3.3.5}$$

当且仅当 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 线性相关时,等号成立.

由于线性空间及内积运算的抽象性与广泛性,Cauchy-Schwarz 不等式也有着广泛的应用.比如在函数空间 $\mathbb{C}[a,b]$ 中,它就摇身一变,成了积分形式的不等式:

$$\left|\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x\right|\leqslant\sqrt{\int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x}\cdot\sqrt{\int_a^b g^2(x)\mathrm{d}x}\tag{3.3.6}$$



图 3-6　施瓦茨(1843—1921)

施瓦茨(Hermann Amandus Schwarz,见图 3-6)因喜爱化学而进入柏林工业大学,可是不久受波尔克(Karl Pohlke,1810—1876,工程图学中波尔克定理的提出者)影响,迷上几何,进而修读了魏尔斯特拉斯(Karl Theodor Wilhelm Weierstrass,1815—1897)的"积分学"(当年的笔记如今还在),并在魏尔斯特拉斯的指导下获得数学博士学位.他的博士论文审稿人库默尔(Ernst Eduard Kummer,1810—1893)后来成为他的岳父.

在庆祝魏尔斯特拉斯 70 大寿的纪念文集中,他回答了"给定的极小曲面是否具有最小面积",其中就包含了不等式(3.3.6).但对几何的深厚感情所带来的伟大的直觉洞察力,使得他能够从更高层面看待这个不等式,从而使用了更具一般性的方法.这样的方法适用于算术、几何、函数论等许多领域.换句话说,他已经意识到不等式(3.3.5),虽然其现代意义下的证明直到 1918 年才由外尔给出.

前面欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 中的范数、角度等概念和性质也可以推广到欧氏空间 V.

定义 3.3.2　对欧氏空间 V 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha}$,称 $\sqrt{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$ 为向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的**范数**(norm),记为 $\|\boldsymbol{\alpha}\|$.特别地,满足 $\|\boldsymbol{\alpha}\|=1$ 的向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 也被称为单位向量.

对于欧氏空间 V 中的任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$,称 $\theta=\arccos\dfrac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{\|\boldsymbol{\alpha}\|\cdot\|\boldsymbol{\beta}\|}$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的**夹角**(angle).特别地,当 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=0$ 即 $\theta=90^\circ$ 时,称 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ **正交**(orthogonal),记为 $\boldsymbol{\alpha}\perp\boldsymbol{\beta}$.

易证欧氏空间 V 中的范数 $\|\boldsymbol{\alpha}\|$ 也满足正定性、正齐性和三角不等式，以及平行四边形公式和勾股定理.

在引入欧氏空间 V 的标准正交基之前，显然我们得先弄明白该如何判定 V 中向量组的线性无关性？在上一章，对部分线性空间，我们探索过这个问题，但现在的问题是有了内积的束缚.看来先得用相关工具把内积表示出来，这个工具就是——坐标！对，通过给出欧氏空间 V 中内积的坐标表示形式，可以解决判定问题.

设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的任意一组基，向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 在此基下的坐标分别 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$，则内积

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})&=(\sum_{i=1}^{n}x_i\boldsymbol{\alpha}_i,\sum_{j=1}^{n}y_j\boldsymbol{\alpha}_j)=\sum_{i=1}^{n}x_i(\boldsymbol{\alpha}_i,\sum_{j=1}^{n}y_j\boldsymbol{\alpha}_j)\quad(\text{内积的双线性性})\\&=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_iy_j(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\end{aligned}$$

按照二次型的记号，上式可写成

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}\tag{3.3.7}$$

由于 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 的任意性，显然矩阵 $\boldsymbol{G}$ 就代表了内积，这似乎又印证了“万物皆数”.

定义 3.3.3　欧氏空间 V 的一个向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 的 **Gram 矩阵**指的是

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)=\begin{pmatrix}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)&(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)&\cdots&(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_s)\\(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)&(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)&\cdots&(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_s)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\(\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_1)&(\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_2)&\cdots&(\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_s)\end{pmatrix}$$

特别地，V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 的 Gram 矩阵又被称为这组基的**度量矩阵**(metric matrix).

可以证明 Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是对称正定矩阵.

定理 3.3.2　设 $\boldsymbol{G}$ 是欧氏空间 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 的度量矩阵，则

(1) $\boldsymbol{G}$ 是对称矩阵，即 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{G}$；

(2) $\boldsymbol{G}$ 是可逆矩阵；

(3) $\boldsymbol{G}$ 是实正定矩阵.

定理 3.3.3　欧氏空间 V 在不同基下的度量矩阵是合同的. 即若 $\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}'$ 分别是欧氏空间 V 的两组基 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 和 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 的度量矩阵，并且

$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P}$$

则 $\boldsymbol{G}'=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{P}$.

现在可以给出判定向量组线性无关的方法了.

定理 3.3.4　欧氏空间 V 中的向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 线性无关的充要条件是 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 的 Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{G}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$ 非奇异即可逆.

证明：先证必要性. 如果 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 线性无关，则它们也是 $W=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s)$

的一组基. 假设 $\boldsymbol{G}$ 奇异,则 $\boldsymbol{Gx}=\boldsymbol{0}$ 有非零解 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^s$, 从而 $\boldsymbol{\alpha}\neq\boldsymbol{0}$, 其中 $\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\alpha}_1+x_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+x_s\boldsymbol{\alpha}_s$, 故由正定性可知 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})\neq 0$. 但同时又有

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})=(\sum_{i=1}^{s}x_i\boldsymbol{\alpha}_i,\sum_{i=1}^{s}x_i\boldsymbol{\alpha}_i)=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s}(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)x_ix_j=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Gx}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{0}=0$$

显然这里出现了矛盾.

再证充分性. 如果 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 线性相关,不妨令 $\boldsymbol{\alpha}_s=t_1\boldsymbol{\alpha}_1+t_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots t_{s-1}\boldsymbol{\alpha}_{s-1}$, 则

$$|\boldsymbol{G}|=\begin{vmatrix}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_1,\sum_{i=1}^{s-1}t_i\boldsymbol{\alpha}_i)\\ (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_2,\sum_{i=1}^{s-1}t_i\boldsymbol{\alpha}_i)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_s,\sum_{i=1}^{s-1}t_i\boldsymbol{\alpha}_i)\end{vmatrix}$$

$$=\begin{vmatrix}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & \sum_{i=1}^{s-1}t_i(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_i)\\ (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & \sum_{i=1}^{s-1}t_i(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_i)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_{r-1}) & \sum_{i=1}^{s-1}t_i(\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_i)\end{vmatrix}\text{（内积的双线性性）}$$

$$=\sum_{i=1}^{s-1}t_i\begin{vmatrix}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_i)\\ (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_i)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_1) & \cdots & (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_{s-1}) & (\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_i)\end{vmatrix}=0$$

这显然与 $\boldsymbol{G}$ 非奇异矛盾,所以 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 线性无关.

例 3.3.6　用矩阵方法重解例 3.3.4.

解: 首先求自然基 $1,t,t^2$ 的度量矩阵 $\boldsymbol{G}$.

$$g_{11}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)=(1,1)=\int_{-1}^{1}1\cdot 1\mathrm{d}t=2$$

$$g_{12}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=(1,t)=\int_{-1}^{1}1\cdot t\mathrm{d}t=0$$

$$g_{13}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_3)=\frac{2}{3},\ g_{22}=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)=\frac{2}{3},\ g_{23}=0,\ g_{33}=\frac{2}{5}$$

由于度量矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是对称矩阵，则 $\boldsymbol{G}=\begin{pmatrix} 2 & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{5} \end{pmatrix}$.

$f(t)$ 和 $g(t)$ 在自然基下的坐标分别是 $\boldsymbol{x}=(1,-1,1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{y}=(1,-4,-5)^{\mathrm{T}}$. 故所求内积为

$$(f,g)=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}=0$$

注意：这里的多项式 $f(t)$ 与 $g(t)$ 是互相正交即互相垂直的，你能想象吗？另外，与例 3.3.4 相比，本题采用的矩阵方法，计算量显然更大，那么引入矩阵方法的意义又何在呢？

例 3.3.7　判定欧氏空间 $\mathbb{C}[0,1]$ 中的函数组 $1,6x,2\mathrm{e}^x$ 是线性无关的.

解：设 $f_1=1, f_2=x, f_3=\mathrm{e}^x$，计算可知 $\boldsymbol{G}=\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2(\mathrm{e}-1) \\ 3 & 12 & 12 \\ 2(\mathrm{e}-1) & 12 & 2(\mathrm{e}^2-1) \end{pmatrix}$，这里 $g_{ij}=(f_i,f_j)$，$i,j=1,2,3$. 由于 $\det\boldsymbol{G}\neq 0$，因此函数组 $1,6x,2\mathrm{e}^x$ 是线性无关的.

3.3.2　欧氏空间的标准正交基

在 $\mathbb{R}^3$ 中，选取自然基 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$，则度量矩阵

$$\boldsymbol{G}=\begin{pmatrix} (i,i) & (i,j) & (i,k) \\ (j,i) & (j,j) & (j,k) \\ (k,i) & (k,j) & (k,k) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}=\boldsymbol{I}$$

此时由式 (3.3.7) 可知，对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\mathbb{R}^3$，有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{I}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，即此时内积是标准内积，并且用坐标计算内积的公式有最简单的形式. 我们当然希望在欧氏空间中通过适当选取基，使得欧氏空间的度量矩阵也是单位矩阵，或者尽可能简单些.

定义 3.3.4　如果欧氏空间 V 的一组基两两正交，就称之为 V 的一组正交基. 如果这组正交基的每个基向量又都是单位向量，则称之为 V 的一组标准正交基.

由傅立叶级数的知识可知，欧氏空间 $\mathbb{C}[0,2\pi]$ 的一组标准正交基是

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}},\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos x,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin x,\cdots,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos nx,\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin nx,\cdots$$

在小波分析及有限元等学科中，小波基和有限元实际上也是相应欧氏空间的正交基函数.

同欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 一样，在欧氏空间 V 中，正交性是特殊的线性无关性.

定理 3.3.5　若向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 是欧氏空间 V 中一组非零的正交向量组，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_s$ 必线性无关.

证明：设有 $k_1,k_2,\cdots,k_s$ 使 $k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s=\boldsymbol{\theta}$，用 $\boldsymbol{\alpha}_j\ (j=1,2,\cdots,s)$ 与等式

两端做内积，得

$$(k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_s\boldsymbol{\alpha}_s,\boldsymbol{\alpha}_j)=\sum_{i=1}^{s}k_i(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\alpha}_j)=0$$

由于 $(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=0\ (i\neq j)$ 以及 $(\boldsymbol{\alpha}_j,\boldsymbol{\alpha}_j)\neq 0$，因此 $k_j=0\ (j=1,2,\cdots,s)$. 证毕.

因此，剩下的情形同欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 类似，即欧氏空间 V 也可以有 Gram-Schmidt 正交化过程.

我们来谈谈 Gram-Schmidt 正交化过程的两位发明人.



图 3-7 格拉姆(1850—1916)

格拉姆(Jorgen Pedersen Gram，见图 3-7)长期任职于丹麦的 Hafnia 保险公司，因此他本质上是一位业余数学家，尽管他拥有理学博士学位. 他的研究领域涉及不变量理论、森林模型、概率和数值分析、数论等. 他经常在丹麦数学会演讲，并担任数学杂志的编委和审稿人. 遗憾的是，由于语言问题，他的森林管理和开发模型虽然比德国数学家的更佳，却没能获得应有的国际地位. 让人哭笑不得的是，虽然他如今因 Gram-Schmidt 正交化过程而闻名，但他并不是第一个使用这种方法的人. 事实上，更早些时候，拉普拉斯和柯西都使用过这种方法. 更令人唏嘘不已的是，他死于突发的车祸. 撞死他的，不是汽车，而是自行车!



图 3-8 施密特(1876—1959)

与格拉姆相比，施密特(Erhard Schmidt，见图 3-8)则一直人生得意，而且他的工作显著地影响了 20 世纪数学的发展方向. 他是那些被希尔伯特的显赫声望吸引到哥廷根从事积分方程研究的青年才俊之一. 大约在 1905 年，基于希尔伯特对带对称核的积分方程的研究，他证明了此时积分方程具有实特征值(按希尔伯特的术语)，并将与这些特征值相对应的解称为**正交函数**. 两年后，他给出了从线性无关函数组构造正交函数组的方法，即如今的 Gram-Schmidt 正交化过程. 1908 年，他发表了一篇重要论文，涉及有无限个未知数、无限个方程的方程组，在文中他引入了大量欧氏几何中的记号和术语，它们如今仍被使用在函数空间和欧氏空间中. 他将空间 H (即如今所谓希尔伯特空间)定义为平方可和复数序列的集合，并定义了内积、范数等概念. 在文中他还再次给出了 Gram-Schmidt 正交化过程，并研究了投影和谱分解. 这些工作使得他理所当然地被视为现代抽象泛函分析的创始人之一.

取标准正交基的种种益处，现在可概括为下面的定理:

定理 3.3.6 设 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 是欧氏空间 V 的一组标准正交基，则对任意向量

$$\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+x_2\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{\varepsilon}_n\in V$$

有 $x_i=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_i)$, $i=1,2,\cdots,n$, 也就是说，**向量的坐标分量是该向量与相应基向量的内积.**

定理 3.3.7 设$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$是欧氏空间$V$的一组标准正交基,则对$V$中的任意两个向量

$$\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+x_2\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{\varepsilon}_n,\ \boldsymbol{\beta}=b_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+b_2\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+b_n\boldsymbol{\varepsilon}_n$$

仍然有

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=a_1b_1+a_2b_2+\cdots+a_nb_n$$

从上面的定理看,欧氏空间V中向量的内积具有了$\mathbb{R}^n$中标准内积的简单形式,即**向量的内积就是(标准正交基下)坐标向量的内积**.这样,借助于基和坐标,各种欧氏空间中"向量"的内积运算,都可转化为欧氏空间$\mathbb{R}^n$中的内积运算.万物再一次皆数,毕达哥拉斯主义又胜一局.

再来看欧氏空间V中两组标准正交基间的过渡矩阵.虽然在线性空间中,一组基不一定能构成矩阵,但是两组基之间的过渡矩阵却是可逆矩阵.因此对于带内积的线性空间,即如今的欧氏空间,虽然标准正交基同样不一定能构成矩阵,但标准正交基间的过渡矩阵肯定要比可逆矩阵特殊.联想到欧氏空间$\mathbb{R}^n$中以标准正交基为列向量的矩阵是非常特殊的正交矩阵,而欧氏空间$\mathbb{R}^n$是特殊的欧氏空间V,我们自然希望欧氏空间V也有如此好运.

定理 3.3.8 设$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$和$\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$是欧氏空间$V$的两组标准正交基,则两组基间的过渡矩阵是正交矩阵.

证明:设两组标准正交基间的过渡矩阵为$\boldsymbol{P}$,即有

$$(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n)=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\begin{pmatrix}p_{11}&p_{21}&\cdots&p_{m1}\\p_{12}&p_{22}&\cdots&p_{m2}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\p_{1n}&p_{2n}&\cdots&p_{mn}\end{pmatrix}$$

显然矩阵$\boldsymbol{P}$的各列就是$\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_n$在标准正交基$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$下的坐标,故由定理3.3.7可知

$$(\boldsymbol{\eta}_i,\boldsymbol{\eta}_j)=p_{i1}p_{j1}+\cdots+p_{in}p_{jn}$$

由于$\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_n$也是标准正交基,所以$(\eta_i,\eta_j)=\delta_{ij}$,从而$p_{i1}p_{j1}+\cdots+p_{in}p_{jn}=\delta_{ij}$,也就是$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$,即矩阵$\boldsymbol{P}$是正交矩阵.证毕.

由定理3.3.8可以想到,标准正交基$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$通过正交矩阵$\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_n)$过渡而来的向量组$\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_n$一定也是标准正交基.因为

$$\begin{aligned}(\eta_i,\eta_j)&=(p_{i1}\boldsymbol{\varepsilon}_1+p_{i2}\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+p_{in}\boldsymbol{\varepsilon}_n,p_{j1}\boldsymbol{\varepsilon}_1+p_{j2}\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+p_{jn}\boldsymbol{\varepsilon}_n)\\&=\sum_{k=1}^{n}p_{ik}p_{jk}(\boldsymbol{\varepsilon}_k,\boldsymbol{\varepsilon}_k)=\sum_{k=1}^{n}p_{ik}p_{jk}=p_i^{\mathrm{T}}p_j=\delta_{ij}\end{aligned}$$

定理 3.3.9 若在欧氏空间V中,向量组$\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$在标准正交基$\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$下的矩阵$\boldsymbol{P}$是正交矩阵,则向量组$\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$也是$V$的标准正交基.

例 3.3.8 已知$V=\{\boldsymbol{X}=(x_{ij})\mid x_{21}-x_{22}=0\}$是带标准内积的矩阵空间$\mathbb{R}^{2\times2}$的

子空间,求 V 的一组标准正交基,使得 V 中的线性变换 $\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{X}\begin{pmatrix}1&2\\2&1\end{pmatrix}$ 在该基下的矩阵为对角矩阵.

解:首先,注意到 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的自然基 $\boldsymbol{E}_{11},\boldsymbol{E}_{12},\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{22}$ 不符合要求(理由是什么?).

其次,由于

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}x_{11}&x_{12}\\x_{21}&x_{21}\end{pmatrix}=x_{11}\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}+x_{12}\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}+x_{21}\begin{pmatrix}0&0\\1&1\end{pmatrix}$$

记 $\boldsymbol{X}_1=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\boldsymbol{X}_2=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\boldsymbol{X}_3=\begin{pmatrix}0&0\\1&1\end{pmatrix}$. 显然

$$(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2)=\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_2)=0$$
$$(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_3)=\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_3)=0$$
$$(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_3)=\operatorname{tr}(\boldsymbol{X}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_3)=0$$

因此 $\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_3$ 是一组正交基,这样所求似乎就是它标准化后的结果,即

$$\boldsymbol{Y}_1=\frac{\boldsymbol{X}_1}{\sqrt{(\boldsymbol{X}_1,\boldsymbol{X}_1)}}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$$
$$\boldsymbol{Y}_2=\frac{\boldsymbol{X}_2}{\sqrt{(\boldsymbol{X}_2,\boldsymbol{X}_2)}}=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}$$
$$\boldsymbol{Y}_3=\frac{\boldsymbol{X}_3}{\sqrt{(\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}_3)}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0\\1&1\end{pmatrix}$$

遗憾的是,$\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3$ 在线性变换 $\mathcal{T}$ 下的矩阵不是对角阵!

不过,前面的工作并没有白做. 我们可以从 $\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3$ 出发,通过正交矩阵,将之过渡到欲求的标准正交基. 联想到实对称矩阵可以正交对角化,因此可以结合线性变换,寻找出相应的实对称矩阵. 由于

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{Y}_1)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2\\2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2\\0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{Y}_1+2\boldsymbol{Y}_2$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{Y}_2)=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2\\2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1\\0&0\end{pmatrix}=2\boldsymbol{Y}_1+\boldsymbol{Y}_2$$

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{Y}_3)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2\\2&1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0\\3&3\end{pmatrix}=3\boldsymbol{Y}_3$$

此即

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\begin{pmatrix}1&2&0\\2&1&0\\0&0&3\end{pmatrix}\equiv(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\boldsymbol{A}$$

显然，这里的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是实对称矩阵！

将实对称矩阵正交对角化，可得正交矩阵 $\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}$，它使得

$$\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(3,3,-1)$$

故由定理 3.3.9，令 $(\boldsymbol{Z}_1,\boldsymbol{Z}_2,\boldsymbol{Z}_3)=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\boldsymbol{Q}$，其中 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)$，则得所求的标准正交基为

$$\boldsymbol{Z}_1=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\,q_1=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=\boldsymbol{Y}_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Z}_2=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\,q_2=\frac{\sqrt{2}}{2}\boldsymbol{Y}_1+\frac{\sqrt{2}}{2}\boldsymbol{Y}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Z}_3=(\boldsymbol{Y}_1,\boldsymbol{Y}_2,\boldsymbol{Y}_3)\,q_3=-\frac{\sqrt{2}}{2}\boldsymbol{Y}_1+\frac{\sqrt{2}}{2}\boldsymbol{Y}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

例 3.3.9　在多项式空间 $\mathbb{R}[t]_4$ 中，定义权函数为 $\dfrac{1}{\sqrt{1-t^2}}$ 的带权内积为

$$(f,g)=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}f(t)g(t)\mathrm{d}t,\quad f,g\in\mathbb{R}[t]_4$$

试求 $\mathbb{R}[t]_4$ 的一组正交基.

解：显然应该从 $\mathbb{R}[t]_4$ 的自然基 $1,t,t^2,t^3$ 出发，对之应用正交化过程即可.

令 $f_1=1,f_2=t,f_3=t^2,f_4=t^3$，则所求为

$$g_1=f_1=1,g_2=f_2-\frac{(f_2,g_1)}{(g_1,g_1)}g_1=t-\frac{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t\cdot 1\mathrm{d}t}{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot 1\cdot 1\mathrm{d}t}\cdot 1=t$$

$$g_3=f_3-\frac{(f_3,g_1)}{(g_1,g_1)}g_1-\frac{(f_3,g_2)}{(g_2,g_2)}g_2$$

$$=t^2-\frac{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t^2\cdot 1\mathrm{d}t}{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot 1\cdot 1\mathrm{d}t}\cdot 1-\frac{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t^2\cdot t\mathrm{d}t}{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t\cdot t\mathrm{d}t}\cdot t=t^2-\frac{1}{2}$$

$$g_4=g_4-\frac{(f_4,g_1)}{(g_1,g_1)}g_1-\frac{(f_4,g_2)}{(g_2,g_2)}g_2-\frac{(f_4,g_3)}{(g_3,g_3)}g_3$$

$$=t^3-\frac{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t^3\cdot 1\mathrm{d}t}{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot 1\cdot 1\mathrm{d}t}\cdot 1-\frac{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t^3\cdot t\mathrm{d}t}{\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t\cdot t\mathrm{d}t}\cdot t$$

$$
-\frac{\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot t^3\cdot\left(t^2-\frac{1}{2}\right)\mathrm{d}t}{\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\cdot\left(t^2-\frac{1}{2}\right)\cdot\left(t^2-\frac{1}{2}\right)\mathrm{d}t}\cdot t^2
$$

$$
=t^3-\frac{3}{4}t
$$

将所有多项式的系数整数化，即得著名的**切比雪夫多项式**(见图 3－9)：

$$
T_0(t)=1, T_1(t)=t, T_2(t)=2t^2-1, T_3(t)=4t^3-3t
$$

一般地，$T_{n+1}(t)=2tT_n(t)-T_{n-1}(t)\ (n\geqslant 1)$.

切比雪夫多项式 $T_n(t)$ 是切比雪夫微分方程 $(1-t^2)x''-tx'+n^2x=0$ 的解. 在信息科学技术中，基于切比雪夫多项式原理设计的切比雪夫滤波器是在通带上频率响应幅度等波纹波动的滤波器，与理想滤波器的频率响应曲线之间的误差最小，是信号处理与滤波器设计的基础性理论.

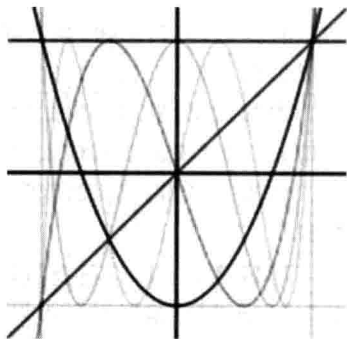


图 3－9　切比雪夫多项式

3.3.3　正交投影定理

以正交的视角来考察子空间及其直和，就得到了正交子空间及正交分解.

定义 3.3.5　设 V_1, V_2 是欧氏空间 V 的两个子空间. 对 V 中的某个向量 $\boldsymbol{\alpha}$，如果对任意 $\boldsymbol{\beta}\in V_1$，都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=0$，则称 $\boldsymbol{\alpha}$ 与子空间 V_1 正交，记为 $\boldsymbol{\alpha}\perp V_1$. 如果对任意 $\boldsymbol{\gamma}\in V_1$，都有 $\boldsymbol{\gamma}\perp V_2$，则称子空间 V_1 与 V_2 正交，记为 $V_1\perp V_2$，并称它们的和为**正交和**，记为 $V_1\oplus V_2$.

可以证明，对两个互相正交的子空间 V_1 与 V_2 而言，它们的正交和 $V_1\oplus V_2$ 一定也是直和 $V_1\oplus V_2$，即 $V_1\cap V_2=\{\boldsymbol{\theta}\}$. 但请注意两个子空间的直和不一定是正交和.

既然正交和是一种特殊的直和，那么它当然具有线性空间中关于直和的相关结论.

另外，V 中所有与子空间 V_1 正交的向量的集合 $\{\boldsymbol{\alpha}\in V\mid\boldsymbol{\alpha}\perp V_1\}$ 也构成 V 的子空间，称为 V_1 的**正交补**(orthogonal complement)，记为 $V_1^{\perp}$.

子空间的正交补是否存在呢？下面的定理给出了回答.

定理 3.3.10　设 V_1 是欧氏空间 V 的子空间，则存在 V_1 的唯一正交补 $V_1^{\perp}$，使得 V 可以正交分解为

$$
V=V_1\oplus V_1^{\perp}
$$

注意：正交分解是特殊的直和分解.

证明：存在性. 设 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_m$ 是 V_1 的一组标准正交基，对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$，令

$$
\boldsymbol{\alpha}_1=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_1)\boldsymbol{\varepsilon}_1+(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_2)\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_m)\boldsymbol{\varepsilon}_m,\ \boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}_1
$$

则 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V_1$，且

$$
(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_i)=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_i)-(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_i)=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_i)-\left(\sum_{j=1}^{m}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_j)\boldsymbol{\varepsilon}_j,\boldsymbol{\varepsilon}_i\right)
$$

$$=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_i)-(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_i)(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\boldsymbol{\varepsilon}_i)=0,\quad i=1,2,\cdots,m$$

故 $\boldsymbol{\alpha}_2$ 与 V_1 中的每个向量都正交,即 $\boldsymbol{\alpha}_2\in V_1^{\perp}$, 注意到 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$ 以及 $V_1\perp V_1^{\perp}$, 因此 $V=V_1\oplus V_1^{\perp}$.

唯一性. 设 V_2,V_3 都是 V_1 的正交补,则对任意 $\boldsymbol{\alpha}_2\in V_2$, 由存在性,有

$$\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_1\in V_1,\boldsymbol{\alpha}_3\in V_3$$

$$\boldsymbol{\alpha}_1=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_1)\boldsymbol{\varepsilon}_1+(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_2)\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\varepsilon}_m)\boldsymbol{\varepsilon}_m$$

又因为 $\boldsymbol{\alpha}_2\perp\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_3\perp\boldsymbol{\alpha}_1$, 所以 $0=(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)+(\boldsymbol{\alpha}_3,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)$. 从而 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\theta}$, $\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{\alpha}_3=\boldsymbol{\alpha}_3\in V_3$. 故 $V_2\subseteq V_3$. 同理可证 $V_3\subseteq V_2$. 因此 $V_2=V_3$. 证毕.

定义 3.3.6　设 V_1 是欧氏空间 V 的子空间. 对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$, 若有 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V_1$, $\boldsymbol{\alpha}_2\in V_1^{\perp}$, 使得 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$, 则称 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的**正交投影**(orthogonal projection).

同上一章的投影变换$\mathcal{P}$一样,从映射的角度看,正交投影仅仅是同态映射,不是同构映射.

定理 3.3.11　**(正交投影定理)**设 V_1 是欧氏空间 V 的子空间,则对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$, 向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上存在唯一的正交投影.

从正交的视角看,齐次线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 显然等价于 $(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{x})=0$, $(\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{x})=0$, $\cdots$, $(\boldsymbol{\beta}_m,\boldsymbol{x})=0$, 这里 $\boldsymbol{\beta}_1^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_2^{\mathrm{T}},\cdots,\boldsymbol{\beta}_m^{\mathrm{T}}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行向量组,即 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m)$. 因此求方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的解向量,就是求所有与向量组 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m$ 正交的向量. 换言之,求齐次方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的解空间 $N(\boldsymbol{A})$, 就是求 $\mathrm{span}\{\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_m\}=R(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 的正交补空间.

一般地,对于矩阵的值域与零空间,存在下列关系.

定理 3.3.12　对任意 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\in\mathbb{R}^{m\times n}$, 有

$$R(\boldsymbol{A})^{\perp}=N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}),R(\boldsymbol{A})\oplus N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=\mathbb{R}^m,\ R(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{\perp}=N(\boldsymbol{A}),R(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\oplus N(\boldsymbol{A})=\mathbb{R}^n.$$

证明:
$$\begin{aligned}R(\boldsymbol{A})^{\perp}&=\{\boldsymbol{\beta}\mid\boldsymbol{\beta}\perp(k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\alpha}_n),k_j\in\mathbb{R}\}\\&=\{\boldsymbol{\beta}\mid\boldsymbol{\beta}\perp\boldsymbol{\alpha}_j,j=1,2,\cdots,n\}=\{\boldsymbol{\beta}\mid\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}=0,j=1,2,\cdots,n\}\\&=\{\boldsymbol{\beta}\mid\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{0},j=1,2,\cdots,n\}=N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\end{aligned}$$

所以 $\mathbb{R}^m=R(\boldsymbol{A})\oplus R(\boldsymbol{A})^{\perp}=R(\boldsymbol{A})\oplus N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$.

同理可证 $R(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\oplus N(\boldsymbol{A})=\mathbb{R}^n$. 证毕.

3.4 最小二乘法

提起最小二乘法,一般将之归功于高斯,他于 1794 年在进行大地测量时首创了此法. 如今最小二乘法已广泛应用于信号处理、自动控制、物理学、统计学、经济学等科学与工程领域,以至于有数学史家不禁感慨:或许 19 世纪最重要的统计方法就是最小二乘法.

3.4.1　解不相容线性方程组的最小二乘法

对于不相容的线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$, 由于该方程组无精确解,因此我们只好设法找出

方程组在某种规则下的最优近似解.最小二乘就是一种典型的规则.

记 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{m\times n}$, $\boldsymbol{b}=(b_1,b_2,\cdots,b_n)$, $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$, 若有 $\tilde{\boldsymbol{x}}=(\tilde{x}_1,\tilde{x}_2,\cdots,\tilde{x}_n)^{\mathrm{T}}$, 使得

$$\|\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{b}\|^2\leqslant\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2=\sum_{i=1}^{m}(a_{i1}x_1+a_{i2}x_2+\cdots+a_{in}x_n-b_i)^2 \tag{3.4.1}$$

就称 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 为方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的**最小二乘解**(least square solution),称求最小二乘解的方法为**最小二乘法**(least square method),称向量 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 为**最小二乘误差向量**,并称其范数 $\|\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{b}\|$ 为**最小二乘误差**(least square error).

从高等数学的眼光看,令

$$f(\boldsymbol{x})=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2=\sum_{i=1}^{m}(a_{i1}x_1+a_{i2}x_2+\cdots+a_{in}x_n-b_i)^2$$

则多元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的最小值满足条件 $\dfrac{\partial f}{\partial x_k}=0\ (k=1,2,\cdots,n)$, 即

$$0=\sum_{i=1}^{m}2a_{ik}(a_{i1}x_1+a_{i2}x_2+\cdots+a_{in}x_n-b_i)$$

写成矩阵形式,则为

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1}\\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n-b_1\\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n-b_2\\ \vdots\\ a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n-b_m\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$$

也就是**法方程**或**正规方程**(normal equation)

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}x-\boldsymbol{b})=\boldsymbol{0} \tag{3.4.2}$$

例 3.4.1　试用代数多项式曲线拟合下列数据:

x_i	1	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	10	5	4	2	1	1	2	3	4

解:如图 3-10 所示,这组数据的变化趋势接近于抛物线,故设所求代数多项式为

$$y(x)=c_0+c_1x+c_2x^2$$

将这组数据代入线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{b}$, 这里

$$\boldsymbol{A}=(x_i^j)_{10\times 3},\quad i=1,\cdots,10;j=0,1,2$$

$$\boldsymbol{c}=(c_0,c_1,c_2)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{b}=(10,5,4,2,1,1,2,3,4)^{\mathrm{T}}$$

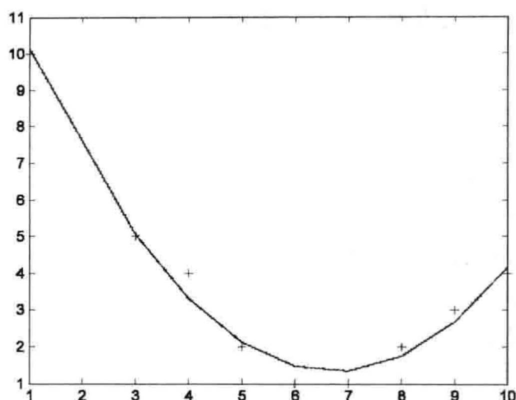


图 3-10　多项式拟合

即得法方程 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}9 & 53 & 381\\ 53 & 381 & 3017\\ 381 & 3017 & 25317\end{pmatrix},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}32\\ 143\\ 1025\end{pmatrix}$$

解得 $\boldsymbol{c}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})=(13.4597,-3.6053,0.2676)^{\mathrm{T}}$，故所求为

$$y=13.4597-3.6053x+0.2676x^2$$

Matlab 中提供了内置函数 polyfit 用以实现多项式拟合，具体请查阅 Matlab 帮助文档. 本题的实现代码为

```
x= [1 3 4 5 6 7 8 9 10];  y= [10 5 4 2 1 1 2 3 4];
p= polyfit(x,y,2);%参数值 2 表示多项式的次数,多项式的系数以降幂方式保存在向量 p 中
plot(x,y,'+ b',x,polyval(p,x),'- r ')
```

3.4.2　最佳逼近定理及其应用

如图 3-11 所示，$\|\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{b}\|$ 表示 $\boldsymbol{b}$ 到 $\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 的距离，$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|$ 则表示 $\boldsymbol{b}$ 到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的距离，显然 $\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\in R(\boldsymbol{A})$，因此 $\|\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{b}\|^2\leqslant\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2$ 即为在 $R(\boldsymbol{A})$ 中找出向量 $\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$，使得向量 $\boldsymbol{b}$ 到 $\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 的距离比 $\boldsymbol{b}$ 到子空间 $R(\boldsymbol{A})$ 中其他向量的距离都短，这样，求不相容方程组的最小二乘解的问题就是求向量 $\boldsymbol{b}$ 在 $R(\boldsymbol{A})$ 上的最佳逼近 $\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$.

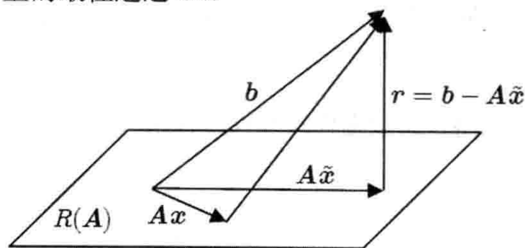


图 3-11　最佳逼近

定义 3.4.1　设 V_1 是欧氏空间 V 的子空间. 对给定的 $\boldsymbol{\alpha}\in V$ 及任意 $\boldsymbol{\gamma}\in V_1$，如果存在 $\boldsymbol{\beta}\in V_1$，使得 $\|\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\alpha}\|\leqslant\|\boldsymbol{\gamma}-\boldsymbol{\alpha}\|$，则称 $\boldsymbol{\beta}$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 在子空间 V_1 上的**最佳逼近**(best approximation).

定理 3.4.1　(最佳逼近定理) 设 V_1 是欧氏空间 V 的子空间. 则对给定的 $\boldsymbol{\alpha}\in$

V，向量 $\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的最佳逼近的充要条件是 $\boldsymbol{\alpha}_2 \equiv \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1^{\perp}$，即 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的正交投影.

证明：必要性. 设 $\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的最佳逼近，但 $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1$ 不正交于 V_1，则至少有一个非零单位向量 $\boldsymbol{\beta} \in V_1$（即 $\|\boldsymbol{\beta}\| = 1$ 且 $\boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\theta}$），使得 $(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}) \neq 0$.

令 $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\alpha}_1 + t\boldsymbol{\beta}$，其中 $t = (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta})$，则 $\boldsymbol{\gamma} \in V_1$，并且

$$\|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\gamma}\|^2 = (\boldsymbol{\alpha}_2 - t\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}_2 - t\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{\alpha}_2\|^2 - |t|^2 = \|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1\|^2 - |t|^2$$

因为 $|t|^2 > 0$，所以 $\|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\gamma}\| < \|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1\|$. 因此 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 不是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的最佳逼近. 出现矛盾.

充分性. 设 $\boldsymbol{\alpha}_1 \in V_1$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_2 = \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1 \perp V_1$，则对任意的 $\boldsymbol{\beta} \in V_1$，显然有 $\boldsymbol{\alpha}_1 - \boldsymbol{\beta} \in V_1$. 因此根据勾股定理，有

$$\|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}\|^2 = \|(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1) + (\boldsymbol{\alpha}_1 - \boldsymbol{\beta})\|^2 = \|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1\|^2 + \|\boldsymbol{\alpha}_1 - \boldsymbol{\beta}\|^2 \geqslant \|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_1\|^2$$

从而 $\boldsymbol{\alpha}_1$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 V_1 上的最佳逼近. 证毕.

根据最佳逼近定理，记 $\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}$，则这样的最小二乘解满足 $\boldsymbol{\gamma} \perp R(\boldsymbol{A})$. 令 $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)$，则 $\boldsymbol{\gamma} \perp \boldsymbol{\alpha}_j$，也就是 $\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\gamma} = 0\ (j = 1, \cdots, n)$，此即 $\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，写成矩阵形式，就是法方程

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

例 3.4.2　证明 $\mathbb{R}^3$ 中定点 $M(x_0, y_0, z_0)$ 到已知平面 $\pi: Ax + By + Cz + D = 0$ 的距离等于

$$d = \frac{|Ax_0 + By_0 + Cz_0|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}}$$

证明：记 π 中所有向量之集为 W，显然 W 是 $\mathbb{R}^3$ 的子空间. 设向量 $\boldsymbol{\alpha} = \overrightarrow{OM} = (x_0, y_0, z_0)$ 到 W 的正交投影为 $\boldsymbol{\alpha}_1$，根据最佳逼近定理，存在向量 $\boldsymbol{\alpha}_2 \in W^{\perp}$，使得

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\alpha}_1 \perp \boldsymbol{\alpha}_2$$

由于 π 的法向量 $\boldsymbol{n} = (A, B, C) \perp W$，即 $\boldsymbol{n} \in W^{\perp}$，从而 $\boldsymbol{e} = \dfrac{\boldsymbol{n}}{\|\boldsymbol{n}\|}$ 为 $W^{\perp}$ 的标准正交基，因此 $\boldsymbol{\alpha}_2 = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{e})\boldsymbol{e}$，所以 $\boldsymbol{\alpha}$ 到 W 的距离为

$$\begin{aligned} d &= \|\boldsymbol{\alpha}_2\| = \|(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{e})\boldsymbol{e}\| = |(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{e})| \\ &= \frac{1}{\|\boldsymbol{n}\|}|(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{n})| = \frac{|Ax_0 + By_0 + Cz_0|}{\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}} \end{aligned}$$

例 3.4.3　**（三角拟合）**对欧氏空间 $\mathbb{C}[0, 2\pi]$ 中的非线性函数 $f(x)$，可在子空间

$$W = \mathrm{span}\{1, \cos x, \sin x, \cdots, \cos nx, \sin nx\}$$

中求 $f(x)$ 的最佳逼近，即求某个三角多项式 $\widetilde{p}_n(x) \in W$，使得对任意 $p_n(x) \in W$，都满足

$$\|f(x) - \widetilde{P}_n(x)\|^2 \leqslant \|f(x) - P_n(x)\|^2 = \int_0^{2\pi} [f(x) - P_n(x)]^2 \mathrm{d}x$$

下面通过一个例子来加以详细说明.

若某地某日的温度记录如下(时间间隔为 3 小时)

t_i	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{8}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{7}{8}$
y_i	-2.2	-2.8	-6.1	-3.9	0.0	1.1	-0.6	-1.1

则用周期模型

$$y = c_1 + c_2\cos 2\pi t + c_3 \sin 2\pi t$$

拟合这些数据的效果如图 3 - 12 所示.

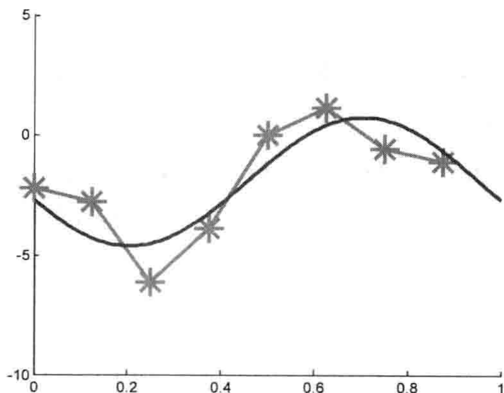


图 3 - 12　三角拟合

例 3.4.4　(泰勒多项式逼近不敌正交多项式逼近)对欧氏空间 $\mathbb{C}[-\pi,\pi]$ 中的函数 $f(x) = \sin x$, 试在子空间 $U = \mathbb{R}[x]_6$ 中找一个多项式 $u_5(x)$, 使得

$$\| f(x) - u_5(x) \|^2 = (f(x) - u_5(x), f(x) - u_5(x)) = \int_{-\pi}^{\pi} [f(x) - u_5(x)]^2 \mathrm{d}x$$

尽可能小.

首先想到的自然是泰勒多项式逼近 $\tilde{u}_5(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!}$.

另一种思路是从自然基 $1, x, x^2, x^3, x^4, x^5$ 出发,通过正交化得到标准正交基 $\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_3, \boldsymbol{\varepsilon}_4, \boldsymbol{\varepsilon}_5, \boldsymbol{\varepsilon}_6$, 然后可得到正交多项式逼近

$$\hat{u}_5(x) = (f, \boldsymbol{\varepsilon}_1)\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \cdots + (f, \boldsymbol{\varepsilon}_6)\boldsymbol{\varepsilon}_6 = 0.987862x - 0.155271x^3 + 0.00564312x^5$$

谁更准确呢? 取 $x = 3$, 可算得两种方法的绝对误差分别为 $|f(3) - \tilde{u}_5(3)| = 0.3839$ 和 $|f(x) - \hat{u}_5(x)| = 0.0014$. 相差近 300 倍!

例 3.4.5　(最小二乘法的条件作用)用 7 次多项式拟合数据 (x_i, y_i), 其中

$$x_i = 2 + 0.2(i-1), y_i = 1 + x_i + x_i^2 + \cdots + x_i^7 \quad (i = 1,2,\cdots,11)$$

使用法方程法,算得的系数为

$$\tilde{\boldsymbol{c}} = (3.4910, -5.1515, 7.4449, -2.7139, 2.2715, 0.7413, 1.0290, 0.9986)^{\mathrm{T}}$$

明显与理论解 $\boldsymbol{c} = (1,1,1,1,1,1,1,1)^{\mathrm{T}}$ 相差悬殊.

用 QR 分解可轻松化解上述尴尬. 使用 QR 分解法来拟合,得到的最小二乘解几乎就是理论解,且最小二乘误差为 1.0467e−011.

事实上,对不相容线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, 这里 $\boldsymbol{A}$ 为 $m \times n\ (m \geqslant n)$ 阶矩阵,设 $\boldsymbol{A}$ 的完全 QR 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR} = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\tilde{\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$, 则 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 变形为 $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$. 记 $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{Rx} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$, 并注意到

$$\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{QRx} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{Rx} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{Qe}$$

因此

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{r}\|^2 &= (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}, \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}) = (\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}, \boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}) \\ &= (\boldsymbol{Qe}, \boldsymbol{Qe}) = (\boldsymbol{Qe})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Qe}) \\ &= \boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Qe} = \boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{e}, \boldsymbol{e}) = \|\boldsymbol{e}\|^2\end{aligned}$$

这说明 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的最小二乘解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 也是 $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解. 令

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = (d_1, d_2, \cdots, d_m)^{\mathrm{T}}, \tilde{\boldsymbol{d}} = (d_1, d_2, \cdots, d_n)^{\mathrm{T}}, \bar{\boldsymbol{d}} = (d_{n+1}, d_{n+2}, \cdots, d_m)^{\mathrm{T}}$$

则 $\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{d}}$, 且 $\|\boldsymbol{e}\| = \|\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{d}}\| + \|\bar{\boldsymbol{d}}\|$. 因此所求最小二乘解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 满足方程 $\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{d}}$, 且最小二乘误差为

$$\|\boldsymbol{r}\| = \|\boldsymbol{e}\| = \|\tilde{\boldsymbol{R}}\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{d}}\| + \|\bar{\boldsymbol{d}}\| = 0 + \|\bar{\boldsymbol{d}}\| = \sqrt{d_{n+1}^2 + d_{n+2}^2 + \cdots + d_m^2}$$

3.5 Householder 变换与 Givens 变换

鉴于正交的重要性,所以相应的正交变换显得尤为重要. Householder 变换(即反射变换)和 Givens 变换(即旋转变换)是两种最重要的正交变换,它们的作用主要是在数值算法中构造正交基. 前面已指出,二维平面中的图形经过旋转变换或反射变换后只是位置改变了,形状和大小都没有改变,所有的长度、角度都保持不变. 而向量的长度和角度都可以由内积来计算. 因此,变换前后的内积保持不变,即两向量的像的内积与原像的内积相等. 由于二维平面是特殊的欧氏空间,因此这个想法自然也可以推广到一般的欧氏空间.

3.5.1 正交变换及其矩阵

定义 3.5.1 欧氏空间 V 上的线性变换 $\mathcal{T}$ 如果保持 V 中的内积不变,即对任意的 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in V$, 都有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}), \mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})) = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) \tag{3.5.1}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 V 上的一个**正交变换**(orthogonal transformation).

易证正交变换也保持欧氏空间 V 中向量的长度、距离及向量间的夹角等几何属性不变.

定理 3.5.1 设$\mathcal{T}$是欧氏空间 V 上的一个线性变换,则下列命题是等价的:

(1)$\mathcal{T}$是正交变换;

(2)$\mathcal{T}$保持向量的范数不变,即对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$,都有 $\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})\|=\|\boldsymbol{\alpha}\|$;

(3)若 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 是 V 的一组标准正交基,则 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$ 也是 V 的标准正交基;

(4)$\mathcal{T}$在 V 的任意一组标准正交基下的矩阵表示为正交矩阵.

证明: (1)⇒(2). 根据正交变换的定义显然成立.

(2)⇒(1). 若线性变换保持长度不变,即 $\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})\|^2=\|\boldsymbol{\alpha}\|^2$, $\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})\|^2=\|\boldsymbol{\beta}\|^2$, 因此

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))=\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})\|^2=\|\boldsymbol{\alpha}\|^2=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})$$
$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))=\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})\|^2=\|\boldsymbol{\beta}\|^2=(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})$$

类似地, $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}))=(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta})$, 展开此式并化简,即得 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$.

(1)⇒(3). 显然成立

(3)⇒(1). 对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$, 令 $\boldsymbol{\alpha}=x_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+\cdots+x_n\boldsymbol{\varepsilon}_n$, $\boldsymbol{\beta}=y_1\boldsymbol{\varepsilon}_1+\cdots+y_n\boldsymbol{\varepsilon}_n$, 则

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=x_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1)+x_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2)+\cdots+x_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$$
$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})=y_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1)+y_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2)+\cdots+y_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$$

因此 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))=x_1y_1+\cdots+x_ny_n=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$.

(3)⇒(4). 设$\mathcal{T}$在 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}$, 即

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n))=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\boldsymbol{A}$$

由于 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$ 也是标准正交基,所以 $\boldsymbol{A}$ 是两组标准正交基间的过渡矩阵,由此可知 $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵.

(4)⇒(3). 设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})$ 是正交矩阵,则

$$\begin{aligned}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_i),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_j))&=(a_{1i}\boldsymbol{\varepsilon}_1+a_{2i}\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+a_{ni}\boldsymbol{\varepsilon}_n,a_{1j}\boldsymbol{\varepsilon}_1+a_{2j}\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+a_{nj}\boldsymbol{\varepsilon}_n)\\&=a_{1i}a_{1j}+\cdots+a_{ni}a_{nj}=\delta_{ij}\end{aligned}$$

所以 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$ 也是标准正交基. 证毕.

根据正交变换与正交矩阵的关系,易知正交变换是可逆的且逆变换仍然是正交变换,而且正交变换的乘积也是正交变换,因为正交矩阵的逆矩阵及正交矩阵的乘积仍然是正交矩阵.

例 3.5.1 **(再探 HouseHolder 变换)**如图 3-13 所示, $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2$ 为 $\mathbb{R}^2$ 的一组标准正交基,显然任意向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^2$ 有正交分解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$, 这里 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2)\boldsymbol{e}_2$, 且 $\boldsymbol{\alpha}\perp\boldsymbol{\beta}$. 因此向量 $\boldsymbol{x}$ 关于“与 $\boldsymbol{e}_2$ 轴正交的直线”(这里就是直线 $\boldsymbol{e}_1$)对称的镜像向量 $\boldsymbol{y}=\mathcal{H}(\boldsymbol{x})\in\mathbb{R}^2$ 的表达式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}&=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2)\boldsymbol{e}_2=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{e}_2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{e}_2)\\&=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}\equiv\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

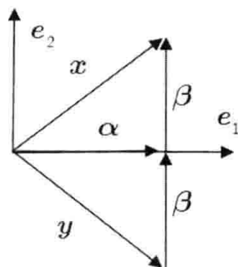


图 3-13　2 维 Householder 变换

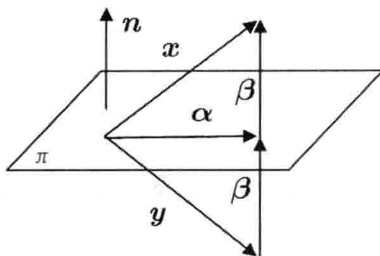


图 3-14　3 维 Householder 变换

显然，这里给出了式 (2.4.2) 中的 HouseHolder 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的另一种表示形式.

在图 3-14 中，设 $\boldsymbol{n}$ 为平面 π 的单位法向量，显然任意向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3$ 也有正交分解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$，这里 $\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}$ 且 $\boldsymbol{\beta}\perp\pi$. 因此向量 $\boldsymbol{x}$ 关于"与 $\boldsymbol{n}$ 正交的平面"(这里就是二维平面 π)对称的镜像向量 $\boldsymbol{y}=\mathcal{H}(\boldsymbol{x})\in\mathbb{R}^3$ 的表达式为

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}\equiv\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}$$

类似地，将向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 变换到向量 $\boldsymbol{y}=\mathcal{H}(\boldsymbol{x})\in\mathbb{R}^n$ 的镜像变换 $\mathcal{H}$，这里 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 关于"与单位向量 $\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n$ 正交的 $n-1$ 维子空间(称为 $n-1$ 维**超平面**)"对称，应该对应矩阵 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}$.

定义 3.5.2　设 $\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n$ 为单位向量，称矩阵 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}$ 为 **Householder 矩阵或初等反射矩阵**)，对应的变换$\mathcal{H}$称为 **Householder 变换或初等反射变换或镜像变换**.

Householder 变换在矩阵计算中占有重要地位，这是因为通过 Householder 变换可以将非零向量 $\boldsymbol{x}$ 反射到某个坐标轴上(与坐标轴同向或反向)，从而可将向量 $\boldsymbol{x}$ 的其余 $n-1$ 个分量变为零. 这在几何上是非常明显的.

定理 3.5.2　对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，存在 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}$，使得 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$，其中 $\boldsymbol{e}_1\in\mathbb{R}^n$ 为标准单位向量.

证明: 若 $\boldsymbol{x}=\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$，则取与 $\boldsymbol{e}_1$ 正交的单位列向量 $\boldsymbol{w}$，从而

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{w},\boldsymbol{x})\boldsymbol{w}=\boldsymbol{x}=\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$$

若 $\boldsymbol{x}\neq\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$，令 $\boldsymbol{w}=\dfrac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|}$，其中 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{x}\mp\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$，注意到 $\|\boldsymbol{v}\|^2=2(\boldsymbol{v},\boldsymbol{x})$，则

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2(\boldsymbol{v},\boldsymbol{x})\frac{\boldsymbol{v}}{\|\boldsymbol{v}\|^2}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{v}=\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$$

证毕.

理论上，$\|\boldsymbol{x}\|$ 前的两种符号都令人满意. 但为了数值稳定性，我们希望向量 $\boldsymbol{x}$ 在大小和方向上都不要太接近 $\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$. 设 $\boldsymbol{x}=(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}}$，几何上易知，当 $\xi_1>0$ 时，$\|\boldsymbol{x}\|$ 前应取负号，当 $\xi_1<0$ 时则应取正号，即

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=-\operatorname{sgn}(\xi_1)\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$$

事实上，若取 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\operatorname{sgn}(\xi_1)\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$，此时向量

$$v = x - Hx = x - \mathrm{sgn}(\xi_1)\|x\|e_1$$

就容易接近零向量. 例如,当 $\xi_1 > 0$ 时,若有 $x \approx \|x\|e_1$,则

$$v = (\xi_1 - \sqrt{\xi_1^2 + \cdots \xi_n^2}, \xi_2, \cdots, \xi_n) \approx \mathbf{0}$$

这是因为 v 的第一个分量近似为零,这导致 $\xi_2{}^2 + \cdots + \xi_n{}^2 \approx 0$, 即 v 的其余分量也近似为零. 所以为了避免出现"几乎为零向量"的 v, 应令

$$v = x + \mathrm{sgn}(\xi_1)\|x\|e_1$$

这样至少可保证 $\|v\| \geqslant \|x\|$.

定理 3.5.3 Householder 矩阵 H 具有下列性质:

(1) H 为对称矩阵,即有 $H^{\mathrm{T}} = H$;

(2) H 为对合矩阵或幂等矩阵,即有 $H^2 = I$;

(3) H 的特征值为 1 ($n-1$ 重) 和 -1 (单重);

(4) $\widetilde{H} = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & H \end{pmatrix}$ 仍是 Householder 矩阵.

证明:(1)与(2)是显然的.

(3)设 $H = I - 2uu^{\mathrm{T}}$, 则 $\mathrm{tr}(H) = \mathrm{tr}(I) - 2\mathrm{tr}(uu^{\mathrm{T}}) = n - 2\mathrm{tr}(u^{\mathrm{T}}u) = n - 2$.

设有 $H\alpha = \lambda\alpha$, 则 $\alpha = H^2\alpha = \lambda^2\alpha$, 因此 $\lambda = \pm 1$. 设特征值 1 与 -1 的重数分别为 k_1、k_2, 则 $k_1 + k_2 = n$, $k_1 - k_2 = \mathrm{tr}(H) = n - 2$, 解得 $k_1 = n - 1$, $k_2 = 1$.

(4)设 $H = I - 2uu^{\mathrm{T}}$, 则

$$\begin{aligned} \widetilde{H} &= \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & I - 2uu^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & I_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} O & O \\ O & 2uu^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \\ &= I_{n+r} - 2\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix}(\mathbf{0}^{\mathrm{T}}, u^{\mathrm{T}}) \equiv I_{n+r} - 2\widetilde{u}\,\widetilde{u}^{\mathrm{T}} \end{aligned}$$

显然, $\widetilde{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+r}$ 并且 $\widetilde{u}^{\mathrm{T}}\widetilde{u} = (\mathbf{0}^{\mathrm{T}}, u^{\mathrm{T}})\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix} = u^{\mathrm{T}}u = 1$. 证毕.

例 3.5.2 (**Givens 变换**) 式 (2.4.1) 中给出的 Givens 矩阵 G 是正交矩阵,因此它对应的是一个正交变换. 在式 (2.4.1) 中,如果取 $\sin\theta = \dfrac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}}$, $\cos\theta = \dfrac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}}$. 则 $\eta_2 = 0$ (几何上表示什么意思?),此时 $(\xi_1, \xi_2)^{\mathrm{T}} \mapsto (\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}, 0)^{\mathrm{T}}$.

类似地,向量空间 $\mathbb{R}^3$ 中的任意向量 $x = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^{\mathrm{T}}$ 也可先通过 Givens 变换

$$G_{12}(\theta_1) = \begin{pmatrix} \cos\theta_1 & \sin\theta_1 & 0 \\ -\sin\theta_1 & \cos\theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

变换为 $y = (\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}, 0, \xi_3)^{\mathrm{T}}$. 这里 $\sin\theta_1 = \dfrac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}}$, $\cos\theta_1 = \dfrac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2}}$. 再通过

Givens 变换

$$G_{13}(\theta_2)=\begin{pmatrix}\cos\theta_2 & 0 & \sin\theta_2\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\theta_2 & 0 & \cos\theta_2\end{pmatrix}$$

将 $\boldsymbol{y}$ 变换为 $\boldsymbol{z}=(\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2},0,0)^{\mathrm{T}}$，这里 $\sin\theta_2=\dfrac{\xi_3}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}$，$\cos\theta_2=\dfrac{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}$.

一般地，向量空间 $\mathbb{R}^n$ 中的 Givens 矩阵为

$$G_{ij}(\theta)=\begin{pmatrix}1 &&&&&&&&&\\ &\ddots&&&&&&&&\\ &&1&&&&&&&\\ &&&\cos\theta&&&\sin\theta&&&\\ &&&&1&&&&&\\ &&&&&\ddots&&&&\\ &&&&&&1&&&\\ &&&-\sin\theta&&&\cos\theta&&&\\ &&&&&&&1&&\\ &&&&&&&&\ddots&\\ &&&&&&&&&1\end{pmatrix}\begin{matrix}\\ \\ \\ 第\ i\ 行\\ \\ \\ \\ 第\ j\ 行\\ \\ \\ \\ \end{matrix}$$

在 Matlab 中，提供了内置函数 givens，可用于生成 Givens 矩阵.

Givens 变换在矩阵计算中也很重要，这是因为也可以通过有限次 Givens 变换将非零向量 $\boldsymbol{x}$ 的 $n-1$ 个分量变为零，即可以通过有限次 Givens 变换将向量 $\boldsymbol{x}$ 旋转到某个坐标轴上.

定理 3.5.4　对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，存在有限个 Givens 矩阵的乘积 $\boldsymbol{T}$，使得

$$\boldsymbol{Tx}=\pm\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$$

其中 $\boldsymbol{e}_1\in\mathbb{R}^n$ 为标准单位向量.

另外可以证明，每个 Givens 矩阵可以分解为两个 Householder 矩阵的乘积. 吉文斯(James Wallace Givens，见图 3-15)是美国数学家和计算机科学的先驱. 1936 年，他以“线性空间中的张量坐标”获普林斯顿大学博士学位，导师是鼎鼎大名的韦伯伦(Oswald Veblen，1880—1960，美国数学家和拓扑学家，其工作被应用于原子物理和相对论，以其命名的 Oswald Veblen 奖是数学界的皇冠). 1958 年，他发表“一般矩阵三角化的平面酉旋转变换的计算”一文，提出 Givens 变换. 他还参与了 UNIVAC I 和 ORACLE 等计算机的研制，并担任第十四届 SIAM 主席.



图 3-15　吉文斯(1910—1993)

3.5.2 求 QR 分解的 Householder 变换法

根据定理 3.2.3,对秩为 r 的任意 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$, 存在 m 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 $r\times n$ 阶行满秩矩阵 $\boldsymbol{R}$, 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$, 因此 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$, 即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 通过正交变换 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ 可化为 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$. 由于 Householder 矩阵也是正交矩阵,而正交矩阵的乘积仍然是正交矩阵,因此我们可将正交矩阵 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ 分解为一组 Householder 矩阵的乘积,从而用一组 Householder 变换就可将任意矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变换为上三角矩阵. 这种方法的具体步骤如下:

第一步,当 $\boldsymbol{\alpha}_1\neq\boldsymbol{0}$ 时,存在 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1$, 使得(为方便说明,不妨取正号)

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{\alpha}_1=+a_1\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_1\in\mathbb{R}^m,\ |a_1|=\|\boldsymbol{\alpha}_1\|$$

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{\alpha}_n)\equiv\begin{bmatrix}+a_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{bmatrix}$$

如果 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{0}$, 则令 $\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}$, 直接进行下一步.

第二步,对 $(m-1)\times(n-1)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_1=(\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)$, 当 $\boldsymbol{\beta}_2\neq\boldsymbol{0}$ 时,存在 Householder 矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{H}}_2$, 使得

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{\beta}_2=+a_2\widetilde{\boldsymbol{e}}_1,|a_2|=\|\boldsymbol{\beta}_2\|,\ \widetilde{\boldsymbol{e}}_1\in\mathbb{R}^{m-1}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{A}_1=(\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{\beta}_2,\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{\beta}_3,\cdots,\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{\beta}_n)\equiv\begin{bmatrix}+a_2 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}$$

若令 $\boldsymbol{H}_2=\begin{bmatrix}1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ 0 & \widetilde{\boldsymbol{H}}_2\end{bmatrix}$, 则有 $\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}+a_1 & \times & \times\\ & +a_2 & \times\\ & & \boldsymbol{A}_2\end{bmatrix}$. 如果 $\boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{0}$, 则令 $\boldsymbol{H}_2=\boldsymbol{I}$, 直接进行下一步.

第三步,对 $(m-2)\times(n-2)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_2$ 继续类似的变换,如此至多 $m-1$ 步(当 $m>n$ 时至多 n 步),也即至多可以找到 $m-1$ 个 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1,\boldsymbol{H}_2,\cdots,\boldsymbol{H}_{m-1}$, 使得 $\boldsymbol{H}_{m-1}\cdots\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$ 或 $(\boldsymbol{R}\times)$.

令 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{H}_{m-1}\cdots\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1)^{-1}=\boldsymbol{H}_1^{-1}\boldsymbol{H}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{H}_{m-1}^{-1}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_{m-1}$, 则 $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵,从而由上述算法确实得到 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解.

例 3.5.3 利用 Householder 变换求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解,其中 $\boldsymbol{A}$ 同例 3.2.1.

解:对向量 $\boldsymbol{\alpha}_1=(0,2,0)^{\mathrm{T}}$, 令 $\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{\alpha}_1-\|\boldsymbol{\alpha}_1\|\boldsymbol{e}_1$, 则

$$\boldsymbol{v}_1=(-1,1,0)^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{u}_1=\frac{\boldsymbol{v}_1}{\|\boldsymbol{v}_1\|}=\frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1,0)^{\mathrm{T}}$$

从而得 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$，使得

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\left(\begin{array}{c:cc}2&1&-6\\\hdashline 0&-3&1\\0&4&2\end{array}\right)$$

注意 $\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{\alpha}_1=(2,0,0)^{\mathrm{T}}$，即 $\boldsymbol{\alpha}_1=(0,2,0)^{\mathrm{T}}$ 被 $\boldsymbol{H}_1$ 反射到 $(2,0,0)^{\mathrm{T}}$，而 $\boldsymbol{u}_1$ 实际上是镜射平面 $-x+y=0$ 的法向量.

对向量 $\boldsymbol{\beta}_2=(-3,4)^{\mathrm{T}}$，令 $\widetilde{\boldsymbol{u}}_2=\dfrac{1}{\sqrt{5}}(-2,1)^{\mathrm{T}}$（$\widetilde{\boldsymbol{u}}_2$ 实际上是平面 $-2y+z=0$ 的法向量），可得 Householder 矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{H}}_2=I-2\widetilde{\boldsymbol{u}}_2\widetilde{\boldsymbol{u}}_2^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}-\frac{3}{5}&\frac{4}{5}\\\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\end{pmatrix}$，因此取 $\boldsymbol{H}_2=\begin{pmatrix}1&\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\\boldsymbol{0}&\widetilde{\boldsymbol{H}}_2\end{pmatrix}=$
$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-\frac{3}{5}&\frac{4}{5}\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\end{pmatrix}$，则 $\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\left(\begin{array}{cc:c}2&1&-6\\0&5&1\\\hdashline 0&0&2\end{array}\right)\equiv\boldsymbol{R}$，而且 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2=\begin{pmatrix}0&-\frac{3}{5}&\frac{4}{5}\\1&0&0\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\end{pmatrix}$，故所求也是式 (3.2.4).

注意：在 Matlab 中，提供了内置函数 house，可用于生成 Householder 矩阵，调用格式为

```
[v,beta,s] = gallery('house',x,k);H = eye(n) - beta* V* V'
```

这里 $\boldsymbol{Hx}=s\boldsymbol{e}_1$. 参数 k 用于控制 beta 进而控制 s 的正负，k 取缺省值 0 时所得的 $\boldsymbol{H}$ 就满足

$$\boldsymbol{Hx}=-\operatorname{sgn}(\xi_1)\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1$$

具体可查询 Matlab 中的测试矩阵库 gallery.

尽管函数 house 中提供了实现 Householder 变换的各种选择，但 Matlab 在实现 QR 分解算法时，似乎为简单起见，一律选择了投向正半轴.

例 3.5.4　利用 Householder 变换求矩阵 **A** 的 QR 分解，其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&2\\1&2&3\\1&2&3\\1&1&2\end{pmatrix}$.

解：对向量 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,1,1)^{\mathrm{T}}$，令 $\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{\alpha}_1-\|\boldsymbol{\alpha}_1\|\boldsymbol{e}_1=(-1,1,1,1)^{\mathrm{T}}$，则

$$u_1 = \frac{v_1}{\|v_1\|} = \frac{1}{2}(-1,1,1,1)^T$$

于是 Householder 矩阵

$$H_1 = I - 2u_1u_1^T = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

且$H_1A = \left(\begin{array}{c:cc} 2 & 3 & 5 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \end{array}\right)$.

对向量 $\beta_2 = (0,0,-1)^T$，令 $\tilde{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,-1)^T$（可正可负时 Matlab 选择投向正半轴，$\tilde{u}_2$ 实际上是平面 $x+z=0$ 的法向量)，可得 Householder 矩阵

$$\tilde{H}_2 = I - 2\tilde{u}_2\tilde{u}_2^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

因此取 $H_2 = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{H}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$，从而有

$$H_2H_1A = \left(\begin{array}{cc:c} 2 & 3 & 5 \\ 0 & 1 & 1 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \equiv \begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}.$$

由于向量 $\gamma_3 = (0,0)^T$，故令 $H_3 = I$，从而所求的 QR 分解为

$$A = H_1^T H_2^T H_3^T H_3^T H_2^T H_1^T A = H_1^T H_2^T H_3^T \begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix} = H_1 H_2 \begin{pmatrix} R \\ O \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\begin{array}{cc:cc} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{array}\right)\left(\begin{array}{ccc} 2 & 3 & 5 \\ 0 & 1 & 1 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$$

注意到 $r(A) = 2$，我们可轻易写出 A 的约化 QR 分解.

例 3.5.5　利用 Householder 变换求例 3.2.5 中的矩阵 A 的 QR 分解.

解:计算可知 $\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$,$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 2\sqrt{2} & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$.

前面两例说明,在处理非列满秩矩阵时,与 MGS 算法相比,Householder 变换的优点是不必对结果进行人工改动.

例 3.5.6　利用 Householder 变换求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全 QR 分解,其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3 & 1 & 1\\ 4 & 0 & 2\end{pmatrix}$.

解:计算可知 $\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}0.6 & 0.8\\ 0.8 & -0.6\end{pmatrix}$,$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}5 & 0.6 & 2.2\\ 0 & 0.8 & -0.4\end{pmatrix}$.

在文献[110]中,Moler 给出了 qrsteps 函数,其中涉及如何基于 Householder 变换实现矩阵 A 的 QR 分解,这是否可理解成是对 Matlab 内部所采用算法的粗略描述呢?

3.5.3　下蛋的母鸡

有英国读者极爱《围城》,乃至希望面见钱钟书先生.先生答曰:假如你吃个鸡蛋觉得味道不错,又何必认识那个下蛋的母鸡呢?尽管有这样的先例,但就伟大的 Householder 变换而言,我们必须"爱蛋及鸡",去看看"那只母鸡".



图 3-16　豪斯霍尔德(1904—1993)

豪斯霍尔德(Alston Scott Householder,见图 3-16)是美国艺术和科学院院士,著名的应用数学家、生物学家和矩阵计算专家.他于 1925 年获得美国西北大学的哲学学士学位,两年后获得康奈尔大学的哲学硕士学位.1937 年以关于变分法的研究获得芝加哥大学的数学博士学位之后,他从事了 8 年的生物数学研究.1946 年,他加入美国橡树岭国家实验室(ORNL),并很快成为数值计算领域的领军人物.正如威尔金森所指出的,当时人们关于矩阵计算的知识处在一片混沌之中.尽管人们提出了大量算法,却没有关于它们内在联系的系统研究.正是豪斯霍尔德通过算法分类,证明了当时很多算法的内在本质都是相同的,从而在混沌中引入了秩序.基于他的工作,人们可以将矩阵分解为三角矩阵、对角矩阵、正交矩阵等特殊矩阵的乘积,进而可以开发出灵活而有效的矩阵计算软件包.他的工作同时也大大加快了舍入误差的研究.因此,他的这项成果荣列"20 世纪十大算法".他也是在线性代数中系统地使用范数的先驱者.1958 年,他提出矩阵的 Householder 变换,实现了高效、稳定的 QR 分解.1964 年,他出版了矩阵计算领域的经典著作《数值分析中的矩阵论》.该书用一种统一的视角,将各种结果引入矩阵论之中,仅参考文献就多达 44 页,占全书五分之一的篇幅.毫无疑问,该书代表了当时数值计算领域的最高学术成就,是该领域的学生和研究者的必备文献.1986 年出版的中译本(见图 3-17)只翻译了原书的前三章,即基础理论部分.1969 年,IEEE 计算机分会授予他 Harry M. Goode Memorial 奖,以表彰他在

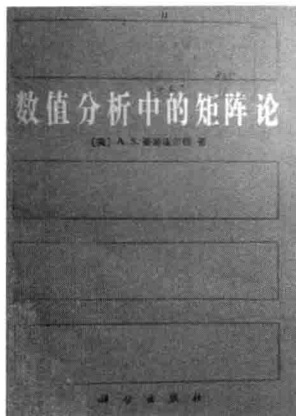


图 3-17 《数值分析中的矩阵论》中译本

应用计算机求解大规模问题的数值方法等方面所做的突出贡献. 同年,他离开 ORNL,转而任教于田纳西大学,直至退休.

在矩阵计算领域,豪斯霍尔德的另一个贡献是发起并组织了多次 Gatlinburg 研讨会. 后来,为表彰他的贡献,1980 年后该研讨会改名为 Householder 研讨会. 研讨会设有 Householder 奖,奖给 3 年来在数值计算的重要领域中最优秀的博士论文(每次只有 1～2 名). 值得一提的是,我国矩阵计算研究的开拓者和奠基人蒋尔雄先生任教于复旦大学期间,指导的学生徐洪国的博士论文获得了 1993 年国际 Householder 奖. 当时除了该生外,亚洲地区自己培养的博士生中尚未有人获得过该奖. 历经 20 年岁月匆匆,如今,在矩阵计算的舞台上,出现了越来越多的亚裔学者的身影.

3.6 酉空间、酉变换与酉矩阵

到目前为止,在内积空间里,我们小心翼翼地尽量避免涉及复数,这是因为复数远比实数复杂,而且实数又是特殊的复数,这意味着关于复数的结论对实数也应当成立,当然反之未必. 从实数到复数在某种程度上也是一种推广. 比如考虑复数 $z \in \mathbb{C}^2$ 的模,由于 $(z,z) = |z|^2 = z\bar{z} = \bar{z}z = \overline{(z,z)}$,因此仅适用于欧氏空间的定义 3.3.1 必须做适度修改. 尽管如此,当欧氏空间中向量的坐标分量的取值由实数域推广为复数域时,向量的内积、标准正交基、向量元素之间的正交变换等概念和结论都可以"平滑地"推广到复内积空间. 所以欧氏空间与复内积空间中的相关结论几乎是"平行的".

定义 3.6.1 设 V 是复数域 $\mathbb{C}$ 上的线性空间. 如果对 V 中任意向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$, 按照某种对应规则,都存在唯一的复数 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \in \mathbb{C}$ 与之对应,并且这种对应还满足下面四个条件:

(1)共轭对称性:对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$, 都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \overline{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}$;

(2)左齐次性:对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$ 和任意 $\lambda \in \mathbb{C}$, 都有 $(\lambda\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \lambda(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$;

(3)左可加性:对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma} \in V$, 都有 $(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}) = (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}) + (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})$;

(4)正定性:对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$, 都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) \geqslant 0$, 当且仅当 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$ 时,等号成立.

则称 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 为 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的**内积**,称定义了内积的线性空间 V 为**复内积空间**,也称为**酉空间**(unitary space).

几点注意:

(1)一般将欧氏空间与酉空间统称为**内积空间**;

(2)当 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 是实数时共轭对称性就特殊化为对称性;

(3)从定义看,内积实际上是一种映射,即 $(\cdot,\cdot): V \times V \mapsto \mathbb{C}$;

(4)向量空间 $\mathbb{C}^n$ **中的标准内积** $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 是

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = x_1\bar{y}_1 + x_2\bar{y}_2 + \cdots + x_n\bar{y}_n = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

其中 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$ 为 $\mathbb{C}^n$ 中的任意向量，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}=(\overline{\boldsymbol{y}})^{\mathrm{T}}$ 是向量 $\boldsymbol{y}$ 的共轭转置.

(5)酉(音 yǒu)是 unitary 的音译，而 unitary 的词根是 unit，表示万数之首，因此酉空间也就有了各类空间的根基所在的韵味，这充分反映了希尔伯特的哲学思想. 译者译以天干地支中的"酉"，的确音神兼备. 当然，如果你有不同看法，等以后有机会碰到希尔伯特先生，可以与他切磋一下.

到目前为止，我们已接触了向量空间、线性空间、欧氏空间、内积空间等"二八佳人"，她们个个"国色天香"、"美艳动人". 事实上，在布尔巴基学派创立的现代结构数学里，这样的"佳人"比比皆是，她们之间的层次关系如图 3－18 所示.

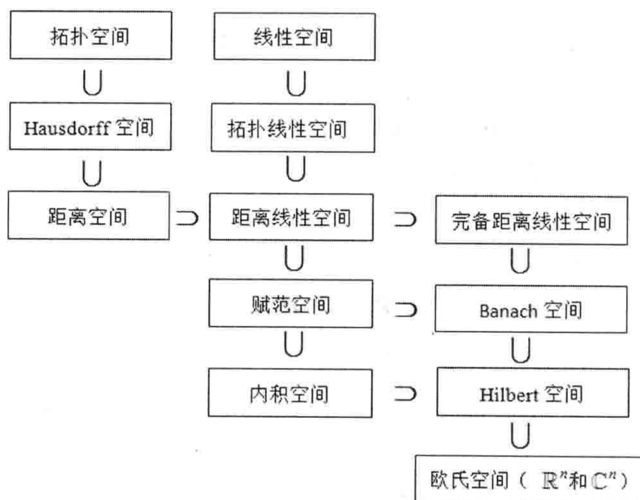


图 3－18　各类空间的层次关系

例 3.6.1　在向量空间 $\mathbb{C}^n$ 中，对任意 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$ 及任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ (这里要求 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$)，则

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

是 $\mathbb{C}^n$ 的一个内积，称为 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 的**复双线性型**(bilinear form)，记为 $[\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}]$，其中 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=(\overline{\boldsymbol{A}})^{\mathrm{T}}$ 是矩阵的复共轭转置矩阵.

我们称满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为 **Hermite 矩阵**，称满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=-\boldsymbol{A}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 为反 Hermite 矩阵. 显然复双线性型是实双线性型的推广，Hermite 矩阵是实对称矩阵的推广，反 Hermite 矩阵则是反对称矩阵的推广.

定义 3.6.2　如果酉空间 V 中的线性变换 $\mathcal{T}$ 保持向量的内积不变，即对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$$

则称 $\mathcal{T}$ 为酉变换(unitary transformation).

根据定义，酉变换也保持酉空间中向量的长度、距离等几何属性不变，因此酉变换是

正交变换的推广. 不过,对酉空间中两向量间的夹角,则不易定义,因为此时内积 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 是复数.

定理 3.6.1 设$\mathcal{T}$是酉空间 V 上的一个线性变换,则下列命题是等价的:

(1)$\mathcal{T}$是酉变换;

(2)$\mathcal{T}$保持向量的范数不变,即 $\|\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})\| = \|\boldsymbol{\alpha}\|$;

(3)若 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 是 V 的一组标准正交基,则 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_2),\cdots,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)$ 也是 V 的标准正交基;

(4) $\mathcal{T}$在 V 的任意一组标准正交基下的矩阵 $\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵(unitary matrix),即

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}$$

显然,酉矩阵是正交矩阵的推广. 请读者注意不要混淆酉矩阵与 Hermite 矩阵.

酉空间 V 还有以下一些重要结论:

(1) 右共轭齐次性: $(\boldsymbol{\alpha},\lambda\boldsymbol{\beta}) = \bar{\lambda}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$.

(2) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\gamma}) = (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) + (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})$.

(3) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta}) = (\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\beta}) = 0$.

(4) Cauchy-Schwartz 不等式(注意左侧是复数 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 的模):

$$|(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})| \leqslant \|\boldsymbol{\alpha}\| \cdot \|\boldsymbol{\beta}\|$$

证明: $\boldsymbol{\beta} = \theta$ 时显然成立. 设 $\boldsymbol{\beta} \neq \boldsymbol{\theta}$, 则

$$0 \leqslant \|\boldsymbol{\alpha} - k\boldsymbol{\beta}\|^2 = (\boldsymbol{\alpha} - k\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha} - k\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) - \bar{k}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) - k(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}) + k\bar{k}(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})$$

在上式中,令 $k = \dfrac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})}$ 并注意到 $|z|^2 = \bar{z}z$,则

$$0 \leqslant (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) - \frac{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta})} = \|\boldsymbol{\alpha}\|^2 - \frac{|(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})|^2}{\|\boldsymbol{\beta}\|^2}$$

整理后即得 Cauchy-Schwartz 不等式.

(5) 向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的长度为 $\|\boldsymbol{\alpha}\| = \sqrt{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$, 并且满足三角不等式

$$\|\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\| \leqslant \|\boldsymbol{\alpha}\| + \|\boldsymbol{\beta}\|$$

证明:
$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\|^2 &= (\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) + (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) + (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha}) + (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta}) \\ &= (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) + 2\mathrm{Re}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) + (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta}) \leqslant (\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}) + 2|(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})| + (\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta}) \\ &\leqslant \|\boldsymbol{\alpha}\|^2 + 2\|\boldsymbol{\alpha}\| \cdot \|\boldsymbol{\beta}\| + \|\boldsymbol{\beta}\|^2 = (\|\boldsymbol{\alpha}\| + \|\boldsymbol{\beta}\|)^2\end{aligned}$$

其中, $\mathrm{Re}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 表示 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$ 的实部.

(6)当两个向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 的内积 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = 0$ 时,称 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 正交.

(7)线性无关向量组都可以用 Schmidt 正交化方法正交化,并扩充成一组标准正交基,也就是说,列满秩的复矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在 **UR 分解**,即存在**半酉矩阵** $\boldsymbol{U}$ (即 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$ 或 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}$)和对角元为正数的上三角矩阵(称为**正线上三角矩阵**) $\boldsymbol{R}$, 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{R}$$

(8)标准正交基 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 下任意两向量的内积为

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = x_1\bar{y}_1 + x_2\bar{y}_2 + \cdots + x_n\bar{y}_n = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

其中 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$ 分别是 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ 的坐标向量,即 V 中向量的内积仍然转化为坐标向量的内积,也就是 $\mathbb{C}^n$ 中的标准内积.

(9)任意一个酉空间 V 都可以正交分解为其子空间 V_1 和 $V_1^{\perp}$ 的直和,即 $V=V_1 \oplus V_1^{\perp}$.

(10)两组标准正交基间的过渡矩阵是酉矩阵.

例 3.6.2　酉矩阵的逆矩阵仍然是酉矩阵;酉矩阵的乘积仍然是酉矩阵.

例 3.6.3　证明:(1)酉矩阵的特征值之模为 1;(2)酉矩阵的相异特征值对应的特征向量互相正交.

证明:(1)设酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 有特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$,即 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$,则 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\bar{\lambda}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$. 由于 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$,故 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\lambda\bar{\lambda}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$. 注意到 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\|\boldsymbol{x}\|^2>0$,因此 $\lambda\bar{\lambda}=1$,此即 $|\lambda|=1$.

(2)设酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 有特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 和 $(\mu,\boldsymbol{y})$,且 $\lambda\neq\mu$,则 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\bar{\mu}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}$,故

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\lambda\bar{\mu}\,\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

显然,当 $\lambda\bar{\mu}\neq 1$ 时即得 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=0$,也就是 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 正交. 事实上,若有 $\lambda\bar{\mu}=1$,则 $\lambda\mu\bar{\mu}=\lambda|\mu|^2=\mu$. 注意到 $|\mu|=1$,因此 $\lambda=\mu$,与已知矛盾. 证毕.

例 3.6.4　若 $\boldsymbol{S},\boldsymbol{T}$ 分别是实对称矩阵和实反对称矩阵,且 $\det(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})\neq 0$,则

$$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}$$

是酉矩阵.

解:由题可知 $\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{S}$,$\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=-\boldsymbol{T}$ 及 $(i\boldsymbol{S})^{\mathrm{H}}=-i\boldsymbol{S}$,注意到 $\boldsymbol{A}^{-\mathrm{H}}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$,则

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} &= [(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}]^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}\\
&= (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}\\
&= (\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})^{-1}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}\\
&= (\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})^{-1}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}\\
&= (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})^{-1}=\boldsymbol{I}
\end{aligned}$$

其中用到的等式 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T}+i\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}-i\boldsymbol{S})$,验算即知是成立的.

习　题　三

3.1　求欧氏空间 $\mathbb{R}^4$ 中与 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1,-1,1)^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{\alpha}_2=(1,-1,-1,1)^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{\alpha}_3=(2,1,1,3)^{\mathrm{T}}$ 都正交的单位向量.

3.2　已知两个线性无关的 n 维 $(n\geqslant 4)$ 向量组(Ⅰ):$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2$ 和(Ⅱ):$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2$,且两向量组正交,证明:$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2$ 线性无关.

3.3　试把 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,0,1,0)^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{\alpha}_2=(0,1,0,2)^{\mathrm{T}}$ 扩充为 $\mathbb{R}^4$ 的一组正交基,再改造成 $\mathbb{R}^4$ 的一组标准正交基.

3.4　证明任意二阶正交矩阵,必取下列两种形式之一:

$$\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix} \text{或} \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\quad(-\pi\leqslant\theta\leqslant\pi)$$

3.5 试用 MGS 算法求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解，其中：

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&4&1\\1&1&1\\0&3&2\end{pmatrix}$；(2) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0\\1&1\\0&1\end{pmatrix}$；(3) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&0\\2&1&1\\2&0&2\end{pmatrix}$；(4) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&0\\1&2&0\\0&0&1\end{pmatrix}$.

3.6 判断命题 3.2.1 的真伪. 如果式(3.2.7)不正确，那么正确的结论又是什么？

3.7 设 $\boldsymbol{\alpha}=(x_1,x_2)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}=(y_1,y_2)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^2$，判断 $\mathbb{R}^2$ 对下列内积定义是否构成欧氏空间：

(1) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=x_1y_1-x_2y_2$；

(2) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=3x_1y_1+5x_2y_2$；

(3) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=|x_1y_1+x_2y_2|$.

3.8 设 $\boldsymbol{\alpha}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n$，证明 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\sum\limits_{k=1}^{n}kx_ky_k$ 是 $\mathbb{R}^n$ 的一个内积，并写出相应的 Cauchy-Schwarz 不等式.

3.9 证明：对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 及 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times m}$，有 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{BA})$.

3.10 证明定理 3.3.2. 及定理 3.3.3.

3.11 设(I)：$\boldsymbol{\alpha}_1=(1,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(1,-1)^{\mathrm{T}}$ 及(II)：$\boldsymbol{\beta}_1=(0,2)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\beta}_2=(6,12)^{\mathrm{T}}$ 为欧氏空间 $\mathbb{R}^2$ 中的两组基，且

$$(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\beta}_1)=1,(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\beta}_2)=15,(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1)=-1,(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_2)=3$$

求：(1)基(I)和基(II)的度量矩阵；(2) $\mathbb{R}^2$ 的一组标准正交基.

3.12 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的一组基，其度量矩阵为 A，V 中向量组 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 满足

$$(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P},\quad \boldsymbol{P}\in\mathbb{R}^{n\times n}$$

证明：$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 是 V 的标准正交基的充要条件是 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{I}$

3.13 证明函数空间 $\mathbb{C}[0,1]$ 中的函数组 $x,\mathrm{e}^x,x\mathrm{e}^x$ 是线性无关的.

3.14 已知欧氏空间 $\mathbb{R}^{2\times2}$ 的子空间 $V=\{\boldsymbol{X}=(x_{ij})\mid x_{11}=x_{22},x_{12}=x_{21}\}$ 及 V 中的线性变换

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{XP}+\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{X}\in V,\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

求 V 的一组标准正交基，使得 $\mathcal{T}$ 在该基下的矩阵为对角矩阵.

3.15 在 $\mathbb{R}[x]_3$ 在下列内积定义下的一组标准正交基：

(1) $(f,g)=\int_{-1}^{1}f(x)g(x)\mathrm{d}x$；

(2) $(f,g)=\int_{0}^{1}f(x)g(x)\mathrm{d}x$；

(3) $(f,g)=\int_{0}^{+\infty}f(x)g(x)\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$.

3.16 已知 $\boldsymbol{\varepsilon}_1$、$\boldsymbol{\varepsilon}_2$、$\boldsymbol{\varepsilon}_3$ 是欧氏空间 V 的一组标准正交基，且

$$\boldsymbol{\alpha}_1=\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\varepsilon}_1+2\boldsymbol{\varepsilon}_2-\boldsymbol{\varepsilon}_3),\boldsymbol{\alpha}_2=\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\varepsilon}_1-\boldsymbol{\varepsilon}_2+2\boldsymbol{\varepsilon}_3)$$

求 $\boldsymbol{\alpha}_3$，使 $\boldsymbol{\alpha}_1$、$\boldsymbol{\alpha}_2$、$\boldsymbol{\alpha}_3$ 也是 V 的一组标准正交基.

3.17 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的一组基. 证明：

(1)如果 $\boldsymbol{\alpha}\in V$ 使得 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_i)=0$，$i=1,2,\cdots,n$，那么 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\theta}$；

(2)如果 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$ 使得对任意 $\boldsymbol{\gamma}\in V$，都有 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma})=(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})=0$，那么 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\beta}$.

3.18 (**Parseval 等式**)设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的一组标准正交基，对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，证明：

(1) $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\sum\limits_{i=1}^{n}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_i)(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\beta}_i)$；(2) $\|\boldsymbol{\alpha}\|^2=\sum\limits_{i=1}^{n}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_i)^2$.

3.19 (**Bessel 不等式**)设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_k$ 为欧氏空间 V 的一组两两正交的单位向量，对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$，证明：

(1) $\sum\limits_{i=1}^{k}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_i)^2\leqslant\|\boldsymbol{\alpha}\|^2$；

(2) $\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\alpha}-\sum\limits_{i=1}^{k}(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_i)\boldsymbol{\alpha}_i$ 与每个 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 都正交($i=1,2,\cdots,k$).

3.20 设 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,0,2,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2=(2,1,2,3)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_3=(0,1,-2,1)^{\mathrm{T}}$，$V_1=\mathrm{span}\{\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3\}$. 求 $V_1^{\perp}$ 的一组基.

3.21 设 $\boldsymbol{\xi}\neq\theta$ 为 n 维欧氏空间 V 中的一个固定向量，证明：$V_1=\{\boldsymbol{\alpha}\mid(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\xi})=0,\boldsymbol{\alpha}\in V\}$ 的维数为 $n-1$.

3.22 设 V_1,V_2 为 n 维欧氏空间 V 的两个子空间，且 $V=V_1\oplus V_2$. 证明：$V=V_1\oplus V_2$ 的充要条件是 V_1 与 V_2 的基 互相正交.

3.23 设 V_1,V_2 为欧氏空间 V 的两个子空间，证明：$(V_1+V_2)^{\perp}=V_1^{\perp}\cap V_2^{\perp}$，$(V_1\cap V_2)^{\perp}=V_1^{\perp}+V_2^{\perp}$.

3.24 求 $N(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基及 $N(\boldsymbol{A})^{\perp}$ 的一组标准正交基，其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&-1&1\\1&1&-2&-1\end{pmatrix}$.

3.25 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 且 $r(\boldsymbol{A}^2)=r(\boldsymbol{A})$. 证明：(1) $N(\boldsymbol{A})+R(\boldsymbol{A})=\{0\}$；(2) $\mathbb{C}^n=N(\boldsymbol{A})\oplus R(\boldsymbol{A})$.

3.26 证明 Fredholm 定理：线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ ($\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$)有解的充要条件是向量 $\boldsymbol{b}\in\mathbb{C}^m$ 与齐次线性方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ 的解空间正交.

3.27 分别使用法方程法和 QR 分解法求不相容线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中：

$$(1)\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\\1&1\end{pmatrix},b=\begin{pmatrix}2\\1\\3\end{pmatrix};(2)\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0\\1&0\\1&0\end{pmatrix},b=\begin{pmatrix}1\\5\\6\end{pmatrix};(3)\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1&0\\0&1&1\\1&2&1\\1&0&1\end{pmatrix},b=\begin{pmatrix}2\\3\\5\\6\end{pmatrix}.$$

3.28 求经过下列数据点的最佳直线和最佳抛物线：

(1) $(0,0),(1,3),(2,3),(5,6)$；(2) $(1,2),(3,2),(4,1),(6,3)$.

3.29 对欧氏空间 V 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha}\in V$ 和某个固定向量 $\boldsymbol{\alpha}_0\in V$，定义**平移变换**为：$\mathcal{M}:\boldsymbol{\alpha}\mapsto\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}_0$. 试问：平移变换 $\mathcal{M}$ 是不是正交变换？为什么？

3.30 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的一组标准正交基，且 $\boldsymbol{\alpha}_0=\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+n\boldsymbol{\alpha}_n$. 证明：线性变换 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\alpha}+k(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_0)\boldsymbol{\alpha}_0$ $(k\neq0)$ 是正交变换当且仅当 $k=$

$-\dfrac{2}{1^2+2^2+\cdots+n^2}$.

3.31 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$ 为欧氏空间 V 的一组标准正交基,求 V 的一个正交变换 $\mathcal{T}$,使得

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)=\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1-2\boldsymbol{\alpha}_2+\boldsymbol{\alpha}_3),\quad \mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)=\frac{1}{3}(2\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2-2\boldsymbol{\alpha}_3)$$

3.32 设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 和 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 为 n 维欧氏空间 V 的两个线性无关向量组,证明:存在正交变换 $\mathcal{T}$,使得 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i)=\boldsymbol{\beta}_i$ 的充要条件是 $(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)=(\boldsymbol{\beta}_i,\boldsymbol{\beta}_j)$ $(i,j=1,2,\cdots,n)$.

3.33 证明每个 Givens 矩阵可以分解为两个 Householder 矩阵的乘积.

3.34 设 $\boldsymbol{H}$ 是 n 阶 Householder 矩阵,证明块对角矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{H}}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{H},\boldsymbol{I}_p)$ 也是 Householder 矩阵.

3.35 设 $\boldsymbol{G}$ 是 n 阶 Givens 矩阵,$\boldsymbol{H},\widetilde{\boldsymbol{H}}$ 是 n 阶 Householder 矩阵,证明 $\boldsymbol{GHG}^{-1}$ 和 $\widetilde{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{H}\widetilde{\boldsymbol{H}}^{-1}$ 都是 Householder 矩阵.

3.36 试用 Householder 变换法求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解,其中 $\boldsymbol{A}$ 同习题 3.5.

3.37 **(极化恒等式)**对酉空间 V 中的任意向量 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta}$,证明:

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=\frac{1}{4}(\|\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\|^2-\|\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}\|^2+i\|\boldsymbol{\alpha}+i\boldsymbol{\beta}\|^2-i\|\boldsymbol{\alpha}-i\boldsymbol{\beta}\|^2)$$

3.38 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,且对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$,都有 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ay})=(\boldsymbol{Bx},\boldsymbol{y})$,证明:$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$.

3.39 对任意 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,验证 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$ 为 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 的一个内积.

3.40 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{R}^{n\times n}$. 证明:矩阵 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{A}+i\boldsymbol{B}$ 是酉矩阵的充要条件是矩阵 $\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A} & -\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{B} & \boldsymbol{A}\end{pmatrix}$ 是正交矩阵.

3.41 证明:酉空间 V 中的向量 $\boldsymbol{\alpha}$、$\boldsymbol{\beta}$ 正交的充要条件是对任意复数 z、w,成立

$$\|z\boldsymbol{\alpha}+w\boldsymbol{\beta}\|=\|z\boldsymbol{\alpha}\|+\|w\boldsymbol{\beta}\|$$

3.42 **(复矩阵的 UR 分解)**已知矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}i & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$,求酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UR}$.

第4章 特殊变换及其矩阵

在矩阵分析与计算中,活跃着大量的特殊矩阵,她们仿若千姿百态的各色美女,有上(下)三角矩阵、三对角矩阵、带状矩阵、对称矩阵、Hermite 矩阵、正交矩阵、酉矩阵、正规矩阵、投影矩阵、Toeplitz 矩阵、Frobenius 矩阵、Vandermonde 矩阵、Z 矩阵、M 矩阵、H 矩阵、对角占优矩阵、非负矩阵、友矩阵、协方差矩阵、随机矩阵、Hamilton 矩阵、辛矩阵、Hilbert 矩阵、Cauchy 矩阵、Leslie 矩阵、幂等矩阵、幂零矩阵、循环矩阵……真是"乱花迷人眼". 矩阵即变换,当她们开始"凌波微步,转盼流睛"之时,更是迷倒一干书生.

4.1 正规变换与正规矩阵

正规变换(正规矩阵)可以说是对称变换(对称矩阵)、正交变换(正交矩阵)、酉变换(酉矩阵)等的推广和抽象,它关心的是个永恒的主题,即矩阵"对角化"的问题. 这又一次体现出了现代数学高度的抽象和统一.

4.1.1 正规变换

我们知道,方阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 互逆的充要条件是 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{I}$. 从纯代数角度看,如果去掉乘积为单位矩阵的限制,那么两方阵是可交换矩阵. 可交换矩阵太过宽泛,这一网撒得大了些. 联想到正交矩阵的逆即为其转置,因此如果再限定两矩阵互为转置,即要求成立 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$, 情况又如何?

显然,对称矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$)和反对称矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A}$)都满足要求,正交矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$)当然也满足这个要求. 因此具有性质 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}}$ 的这种新矩阵就"一统江湖",具有了统一性.

对称矩阵最主要的性质是可以相似对角化,尤其是可以正交对角化,即通过相似变换或正交变换可化为对角矩阵,推广到这种新矩阵后,这个性质是否还能保留呢? 其他性质又如何呢?

定义 4.1.1 对于实方阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$, 如果存在正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$, 使得

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}=\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{AQ}=\boldsymbol{B} \tag{4.1.1}$$

则称 $\boldsymbol{A}$ 正交相似于 $\boldsymbol{B}$, 并称矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 为**正交相似矩阵**.

定义 4.1.2 对于复方阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$, 如果存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}$, 使得

$$U^{\mathrm{H}}AU = U^{-1}AU = B \tag{4.1.2}$$

则称 A **酉相似**(unitary similar)于 B，并称矩阵 U 为**酉相似矩阵**.

上述两定义中，显然酉矩阵与正交矩阵对应，酉相似与正交相似对应. 我们可将正交相似看作特殊的酉相似.

请注意正交相似与正交变换的区别和联系. 事实上，若令

$$\mathcal{S}_Q : A \mapsto B = Q^{\mathrm{T}}AQ = Q^{-1}AQ \tag{4.1.3}$$

显然易证 $\mathcal{S}_Q$ 是 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 中的线性变换，并且对任意 $A_1, A_2 \in \mathbb{R}^{n\times n}$，按 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 的标准内积，有

$$\begin{aligned}(\mathcal{S}_Q(A_1), \mathcal{S}_Q(A_2)) &= (Q^{\mathrm{T}}A_1Q, Q^{\mathrm{T}}A_2Q) = \operatorname{tr}(Q^{\mathrm{T}}A_2^{\mathrm{T}}QQ^{\mathrm{T}}A_1Q) = \operatorname{tr}(Q^{\mathrm{T}}A_2^{\mathrm{T}}A_1Q) \\ &= \operatorname{tr}(A_2^{\mathrm{T}}A_1QQ^{\mathrm{T}}) = \operatorname{tr}(A_2^{\mathrm{T}}A_1) = (A_1, A_2)\end{aligned}$$

即 $\mathcal{S}_Q$ 也是正交变换. 当然，从形式上可将正交相似看成对矩阵 A 做了两次正交变换，即在 A"两侧"分别做了正交变换 Q^{T} 与 Q，因此 $\mathcal{S}_Q$ 也可理解成这两个正交变换的"合成". 今后为叙述方便，我们有时也称矩阵 A 被 Q 正交变换成矩阵 B. 对酉相似及酉变换也存在类似的区别和联系.

定义 4.1.3　对酉空间 V 上的线性变换 $\mathcal{T}$，如果**存在** V 的一组标准正交基 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n$ 及对角矩阵 $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，使得

$$(\mathcal{T}(\varepsilon_1), T(\varepsilon_2), \cdots, \mathcal{T}(\varepsilon_n)) = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)\Lambda \tag{4.1.4}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 V 上的一个**正规变换**(normal transformation)，并称 $\mathcal{T}$ 在**任意**标准正交基 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n$ 下矩阵为**正规矩阵**(normal matrix).

显然，上述定义中的对角矩阵 Λ 也是正规矩阵.

定理 4.1.1　正规变换在不同标准正交基下的正规矩阵是酉相似的.

证明：设正规变换 $\mathcal{T}$ 在酉空间 V 的两组标准正交基 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n$ 和 $\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n$ 下的矩阵分别为 A 和 B，并设 $(\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n) = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)U$，则过渡矩阵 U 是酉矩阵(请读者自证).

由于 $(\mathcal{T}(\eta_1), \mathcal{T}(\eta_2), \cdots, \mathcal{T}(\eta_n)) = (\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n)B$，又

$$\begin{aligned}(\mathcal{T}(\eta_1), \mathcal{T}(\eta_2), \cdots, \mathcal{T}(\eta_n)) &= \mathcal{T}(\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n) = \mathcal{T}((\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)U) \\ &= (\mathcal{T}(\varepsilon_1), \mathcal{T}(\varepsilon_2), \cdots, \mathcal{T}(\varepsilon_n))U(\text{为什么?}) \\ &= (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)AU = (\eta_1, \eta_2, \cdots, \eta_n)U^{\mathrm{H}}AU\end{aligned}$$

所以 $B = U^{\mathrm{H}}AU$. 证毕.

由此定理易知，正规矩阵 A 必定酉相似于一个对角阵 Λ，即存在酉矩阵 U，使得 $U^{\mathrm{H}}AU = U^{-1}AU = \Lambda$，也就是

$$A = U\Lambda U^{-1} = U\Lambda U^{\mathrm{H}} \tag{4.1.5}$$

我们称式(4.1.5)为正规矩阵 A 的**谱分解**(spectral decomposition).

4.1.2　正规矩阵

任意复方阵 A 通过相似变换 P 可化成特殊的 Jordan 矩阵 J，即 $P^{-1}AP = J$，但可逆

矩阵 $\boldsymbol{P}$ 一般不易求逆. 如果 $\boldsymbol{P}$ 特殊化为易求逆的酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，那么 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$ 又是什么样的特殊矩阵呢？结果肯定比 $\boldsymbol{J}$ 更一般些. 考虑到 $\boldsymbol{J}$ 是特殊的带状矩阵或上三角矩阵，因此 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$ 是不是也是带状矩阵或上三角矩阵呢？

定理 4.1.2　(Schur 引理) 任何复方阵 $\boldsymbol{A}$ 必酉相似于一个上三角阵 $\boldsymbol{T}$，即存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{T} \tag{4.1.6}$$

证明: 对矩阵的阶数 n 做归纳法.

当 $n=1$ 时定理显然成立. 设 $n=k-1$ 时定理成立，考虑 $n=k$ 时的情形.

设 $(\lambda_1,\boldsymbol{u}_1)$ 为 k 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征对，并且 $\boldsymbol{u}_1$ 为单位特征向量. 以 $\boldsymbol{u}_1$ 为第一列，将 $\boldsymbol{u}_1$ 扩充为 k 阶酉矩阵 $\boldsymbol{U}_1=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k)$，则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_1=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_k)=(\lambda_1\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_k)$$

由于 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k$ 是 $\mathbb{C}^k$ 的一组标准正交基，所以 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i=\sum_{j=1}^{k}a_{ij}\boldsymbol{u}_j\ (i=2,3,\cdots,k)$. 因此

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_1=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k)\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{A}_1=(a_{st})\ (s,t=2,3,\cdots,k)$ 为 $k-1$ 阶矩阵. 根据归纳假设，存在 $k-1$ 阶酉矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{U}}_2$ 和 $k-1$ 阶上三角矩阵 $\boldsymbol{T}_1$，使得 $\widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\widetilde{\boldsymbol{U}}_2=\boldsymbol{T}_1$. 令 $\boldsymbol{U}_2=\mathrm{diag}(1,\widetilde{\boldsymbol{U}}_2)$，$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2$，易证 $\boldsymbol{U}_2$ 和 $\boldsymbol{U}$ 都是 k 阶酉矩阵，从而

$$\begin{aligned}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}&=\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2=\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_2=\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_2\\&=\begin{pmatrix}1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{U}}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\widetilde{\boldsymbol{U}}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \times\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{T}_1\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{T}\end{aligned}$$

证毕

由式 (4.1.6) 易知

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{T}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{4.1.7}$$

我们称式 (4.1.7) 为任意复方阵 $\boldsymbol{A}$ 的 **Schur 分解**(schur decomposition).

根据 Schur 引理，可得正规矩阵的一个美妙性质，也即前面提到的等式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$，它经常被当成正规矩阵的等价定义.

定理 4.1.3　方阵 $\boldsymbol{A}$ 是正规的，当且仅当 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$.

为证明这个结论，必须再给出一个引理.

引理 4.1.1　满足 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}$ 的三角阵 $\boldsymbol{T}$ 必是对角阵.

证明: 对上三角阵 $\boldsymbol{T}=(t_{ij})$，比较等式 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}$ 两边的乘积矩阵在第 (i,i) 位置上的元素，并注意到 $t_{ij}=0(i>j)$，则对 $i=1,2,\cdots,n$，有 $|t_{ii}|^2+\cdots+|t_{in}|^2=|t_{1i}|^2+\cdots+|t_{ii}|^2$. 当 $i=1$ 时，有 $|t_{11}|^2+|t_{12}|^2+\cdots+|t_{1n}|^2=|t_{11}|^2$，故 $t_{1j}=0(j=2,$

$3,\cdots,n)$. 对 i 施行归纳法可得 $t_{ij}=0(i<j)$. 证毕.

现在给出定理 4.1.3 的证明如下：

定理 4.1.3 的证明：必要性. 如果 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵,那么存在谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$, 因此

$$\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Lambda\bar{\Lambda}}\,\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\bar{\Lambda}\Lambda U}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{U\bar{\Lambda}U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$$

充分性. 根据 Schur 引理,存在 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}}$. 由于

$$\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}})\,(\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{UT}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{UTT}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}},\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UT}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{TU}^{\mathrm{H}}$$

因此 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 等价于 $\boldsymbol{TT}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}$, 根据引理 4.11, $\boldsymbol{T}$ 是对角矩阵. 故 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵. 证毕.

至此,我们可以用更方便的等价定义 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 来判定一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否为正规矩阵. 特别地,可以用 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 来判断一个矩阵是否为实正规矩阵. 矩阵即变换,但在这里矩阵视角反而比变换视角优越.

例 4.1.1　判断下列矩阵是不是正规矩阵：

(1)实对称矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$);

(2)实反对称矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A}$);

(3)正交矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{-1}$);

(4)酉矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{-1}$);

(5)Hermite 矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$);

(6)反 Hermite 矩阵($\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=-\boldsymbol{A}$);

(7)形如 $a\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$ 的矩阵,其中 $a\in\mathbb{C}$.

解：按定理 4.1.3 逐一验算 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ (复矩阵)或 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ (实矩阵)成立即可.

唐高祖武德年间,"(唐太宗)私幸端门,见新进士缀行而出,喜曰:'天下英雄入吾彀中矣!'"举凡对称矩阵、正交矩阵、酉矩阵等诸般矩阵,尽管美丑妍媸、各具形态,如今却都尽入正规矩阵之彀矣!

定理 4.1.4　与正规矩阵酉相似的方阵仍然是正规矩阵.

证明：如果存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}$, 使得 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}$, 则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{BB}^{\mathrm{H}}&=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})\,(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AUU}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\\&=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}\\&=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{UU}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\end{aligned}$$

证毕.

定理 4.1.5　方阵 $\boldsymbol{A}$ 是正规的,当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 与对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 酉相似,并且对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角元就是正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,酉相似矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的各列就是相应的特征向量.

证明：必要性. 如果 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵,那么 $\boldsymbol{A}$ 存在谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{-1}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$, 即 $\boldsymbol{AU}=\boldsymbol{U\Lambda}$. 设 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)$, $\boldsymbol{\Lambda}=\operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$, 则

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)=(\boldsymbol{Au}_1,\boldsymbol{Au}_2,\cdots,\boldsymbol{Au}_n)=(\lambda_1\boldsymbol{u}_1,\lambda_2\boldsymbol{u}_2,\cdots,\lambda_n\boldsymbol{u}_n)$$

显然 $\boldsymbol{Au}_i=\lambda_i\boldsymbol{u}_i$.

充分性. 若 $\boldsymbol{A}$ 与对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 酉相似，即 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\Lambda}$，显然可验证 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 成立. 证毕.

我们知道，实对称矩阵拥有**完备正交系**，即 n 个两两正交的单位特征向量. 定理 4.1.5 则指出了在更一般的正规矩阵中，这个性质得以保留.

定理 4.1.6　方阵 $\boldsymbol{A}$ 是正规的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 有完备正交系.

结合定理 4.1.5 和定理 4.1.6，设正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$，并令 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)$，$\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，$\boldsymbol{G}_i=\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$　$(i=1,2,\cdots,n)$，则

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{u}_n^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}$$

$$=\lambda_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}+\lambda_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\lambda_n\boldsymbol{u}_n\boldsymbol{u}_n^{\mathrm{H}}=\lambda_1\boldsymbol{G}_1+\lambda_2\boldsymbol{G}_2+\cdots+\lambda_n\boldsymbol{G}_n \tag{4.1.8}$$

如果在复矩阵空间 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 中引入内积 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$，则当 $i\neq j$ 时，有

$$(\boldsymbol{G}_i,\boldsymbol{G}_j)=tr(\boldsymbol{G}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G}_i)=tr(\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})=0$$

$$(\boldsymbol{G}_i,\boldsymbol{G}_i)=\mathrm{tr}(\boldsymbol{G}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G}_i)=\mathrm{tr}(\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)=1$$

这里的 $\boldsymbol{G}_1,\boldsymbol{G}_2,\cdots,\boldsymbol{G}_n$ 显然是一组标准正交基(对应的空间是什么?)，因此式 (4.1.8) 也被称为正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**谱分解表达式**.

思考：谱分解表达式意义何在?

例 4.1.2　已知正规矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$，求 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解表达式.

解：易知 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_{1,2}=1\pm i$.

当 $\lambda_1=1+i$ 时，由 $\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix}-i & -1\\ 1 & -i\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1 & -i\\ 0 & 0\end{pmatrix}$ 可知对应 λ_1 的单位特征向量为 $\boldsymbol{u}_1=\left(\frac{i}{\sqrt{2}},\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\mathrm{T}}$；当 $\lambda_2=1-i$ 时，由 $\boldsymbol{A}-\lambda_2\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix}i & -1\\ 1 & i\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1 & i\\ 0 & 0\end{pmatrix}$ 可知对应 λ_2 的单位特征向量为 $\boldsymbol{u}_2=\left(\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{i}{\sqrt{2}}\right)^{\mathrm{T}}$，因此所求为 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i & 1\\ 1 & i\end{pmatrix}$，此时对角矩阵为 $\boldsymbol{\Lambda}=\begin{pmatrix}1+i & 0\\ 0 & 1-i\end{pmatrix}$.

显然可知 $\boldsymbol{G}_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{G}_2=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}$，因此 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解表达式为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}=(1+i)\cdot\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{bmatrix}+(1-i)\cdot\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{bmatrix}=\lambda_1\boldsymbol{G}_1+\lambda_2\boldsymbol{G}_2$$

Matlab 中提供了内置函数 schur，用于计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 分解，其调用格式为

```
[U,T]= schur(A)
```

当 $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵时，调用格式必须修改为

```
[U,T]= schur(A,'complex')
```

例 4.1.3　设 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵，且 $\boldsymbol{A}^3=\boldsymbol{A}^2$，则 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$.

证明:因为 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵，所以有谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，因此

$$\boldsymbol{A}^3=(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})^3=(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})=\boldsymbol{U\Lambda}^3\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}},\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{U\Lambda}^2\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$$

注意到 $\boldsymbol{A}^3=\boldsymbol{A}^2$，故 $\boldsymbol{U\Lambda}^3\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Lambda}^2\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$，这样 $\boldsymbol{\Lambda}^3=\boldsymbol{\Lambda}^2$，也就是 $\lambda_i^3=\lambda_i^2$，解得 $\lambda_i=0$ 或 1，从而 $\boldsymbol{\Lambda}^2=\boldsymbol{\Lambda}$，进而可知 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{U\Lambda}^2\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$. 证毕.

例 4.1.4　设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 均为 n 阶正规矩阵，且 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，则 $\boldsymbol{AB}$ 与 $\boldsymbol{BA}$ 均是正规矩阵.

证明:设 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$，其中 $\boldsymbol{x}$ 为单位向量，则 $\boldsymbol{BAx}=\boldsymbol{ABx}=\lambda\boldsymbol{Bx}$，即 $\boldsymbol{Bx}$ 也是 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 λ 的特征向量，从而存在 μ，使得 $\boldsymbol{Bx}=\mu\boldsymbol{x}$，即 $\boldsymbol{x}$ 也是 $\boldsymbol{B}$ 的属于特征值 μ 的特征向量.

下证可交换矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 可同时酉上三角化，即若 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，则存在酉矩阵 $\boldsymbol{W}$，使得 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AW}$ 和 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW}$ 均为上三角矩阵. 我们对 n 采用归纳法. 显然 $n=1$ 时结论成立.

根据 Schur 引理，将 $\boldsymbol{x}$ 扩充为酉矩阵 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)$，使得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}=\begin{pmatrix}\lambda & \times\\ & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix},\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BU}=\begin{pmatrix}\mu & \times\\ & \boldsymbol{B}_1\end{pmatrix}$$

由 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$ 可知 $(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BU})=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BU})(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU})$，从而 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{A}_1$. 由归纳假设可知，存在 $n-1$ 阶酉矩阵 $\boldsymbol{V}_1$ 和上三角矩阵 $\boldsymbol{T}_1$，使得 $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BV}_1=\boldsymbol{T}_1$. 令 $\boldsymbol{V}=diag(1,\boldsymbol{V}_1)$，$\boldsymbol{W}=\boldsymbol{UV}$，则

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BU})\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}1 & \\ & \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu & \times\\ & \boldsymbol{B}_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \\ & \boldsymbol{V}_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mu & \times\\ & \boldsymbol{T}_1\end{pmatrix}=\boldsymbol{T}$$

即 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW}$ 为上三角矩阵，并且 $\boldsymbol{W}$ 是一个酉矩阵. 同理可知，$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AW}$ 也是上三角矩阵.

由于 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{WRW}^{\mathrm{H}}$，因此 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R})\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}$，$\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{RR}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}$. 注意到 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$，故可得 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{RR}^{\mathrm{H}}$，从而由引理 4.1.1 可知 $\boldsymbol{R}$ 是对角矩阵. 同理可证，$\boldsymbol{T}$ 也是对角矩阵. 这就是说，可交换的正规矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 可同时酉对角化，即存在酉矩阵 $\boldsymbol{W}$，使得 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AW}$ 和 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW}$ 均为对角矩阵.

由于 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 可同时酉对角化，因此 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{ABW}=(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AW})(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW})=\boldsymbol{RT}$，即矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 有完备正交系，此即 $\boldsymbol{AB}$ 是正规矩阵. 同样地，由于 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BAW}=(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BW})(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AW})=\boldsymbol{TR}$，故 $\boldsymbol{BA}$ 也是正规矩阵. 证毕.

例 4.1.5　对于 Sylvester 方程

$$\boldsymbol{AX}-\boldsymbol{XB}=\boldsymbol{C}$$

其中，$\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，定义 Sylvester 变换

$$\mathcal{S}:\boldsymbol{X}\mapsto\mathcal{S}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{AX}-\boldsymbol{XB}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 没有公共特征值，那么变换 $\boldsymbol{S}$ 是可逆的.

证明:先将 Sylvester 方程变成简单形式.

考虑 $\boldsymbol{B}$ 的 schur 分解 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{VTV}^{\mathrm{H}}$，从而 Sylvester 方程转化为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{XV})-(\boldsymbol{XV})\boldsymbol{T}=\boldsymbol{CV}$$

若记 $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{XV},\boldsymbol{D}=\boldsymbol{CV}$，则上式即为特殊的 Sylvester 方程

$$\boldsymbol{AY}-\boldsymbol{YT}=\boldsymbol{D}$$

设 $\boldsymbol{Y}=(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)$，$\boldsymbol{D}=(\boldsymbol{d}_1,\boldsymbol{d}_2,\cdots,\boldsymbol{d}_n)$，$\boldsymbol{T}=(t_{ij})$（注意当 $i>j$ 时 $t_{ij}=0$），则

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)-(\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)\begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & t_{nn} \end{pmatrix}=(\boldsymbol{d}_1,\boldsymbol{d}_2,\cdots,\boldsymbol{d}_n) \quad (4.1.9)$$

因此 $\boldsymbol{Ay}_1-t_{11}\boldsymbol{y}_1=(\boldsymbol{A}-t_{11}\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{d}_1$. 由于 t_{11} 是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值，所以它不是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值. 于是 $\boldsymbol{A}-t_{11}\boldsymbol{I}$ 可逆，即 $\boldsymbol{y}_1$ 是线性方程组 $(\boldsymbol{A}-t_{11}\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{d}_1$ 的唯一解.

接下来，考虑系统 (4.1.9) 第二列的情形，可知

$$\boldsymbol{Ay}_2-t_{22}\boldsymbol{y}_2=(\boldsymbol{A}-t_{22}\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{d}_2+t_{12}\boldsymbol{y}_1$$

由于 $\boldsymbol{y}_1$ 已确定，显然方程右侧唯一确定，注意到 t_{22} 仍是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值，所以它不是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，因此此时 $\boldsymbol{A}-t_{22}\boldsymbol{I}$ 也可逆，即 $\boldsymbol{y}_2$ 是线性方程组 $(\boldsymbol{A}-t_{22}\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{d}_2+t_{12}\boldsymbol{y}_1$ 的唯一解.

类似地，一旦我们确定 $\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_{k-1}$（$k=2,3,\cdots,n$），则 $\boldsymbol{A}-t_{kk}\boldsymbol{I}$ 也可逆，即 $\boldsymbol{y}_k$ 是线性方程组 $(\boldsymbol{A}-t_{kk}\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}_k=\boldsymbol{d}_k+\sum_{i=1}^{k-1}t_{ik}\boldsymbol{y}_i$ 的唯一解.

至此，我们得到 Sylvester 方程的唯一解 $\boldsymbol{Y}$，从而 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{YV}^{\mathrm{H}}$ 是 $\boldsymbol{\mathcal{S}}(\boldsymbol{X})=\boldsymbol{C}$ 的唯一解，故 Sylvester 变换 $\boldsymbol{\mathcal{S}}$ 是可逆的，也就是 Sylvester 方程的解是唯一的. 证毕.


图 4-1　舒尔(1875—1941)

舒尔(Issai Schur，见图 4-1)是德国著名的犹太数学家，其研究涉及群论、矩阵论、代数方程、数论、积分方程和函数论等领域. 在弗罗贝尼乌斯的指导下，他于 1901 年获得柏林大学的博士学位，博士论文研究的是复数域上一般线性群的有理表示，其中引入的函数如今被称为 Schur 函数. 1904—1907 年间，他研究了群的投影表示和群的特征标，并提出了著名的 Schur 引理. 在矩阵分析中，Schur 引理是基础性的结论，而在矩阵计算中，Schur 分解也受到越来越多的关注. 另外本书第一章提及的 Schur 补也是舒尔得到的成果. 1916 年起，他通过演讲和合作研究，在柏林大学开创了群的表示论学派，聚集了一大批青年才俊. 1922 年他光荣地入选普鲁士科学研究院.

随着纳粹的出现，作为犹太人的舒尔，生活日渐艰难. 尽管舒尔将自己当作德国人，并因此拒绝了移民美国和英国的邀请，但他还是在 1933 年被勒令“退休”，这个决定遭到了学生和教授们的公开抗议，因为舒尔深受他们的尊敬和喜爱. 两年后，舒尔被正式解除

了教授职务. 到 1938 年,由于他曾经的同事、纳粹分子比伯巴赫(Ludwig Bieberbach, 1886—1982,以比伯巴赫猜想而闻名)在他的签名后写下的"犹太人到现在居然还是科学委员会的成员,这让我很吃惊",他很快被解除了普鲁士科学研究院的一切职务. 难以理解作为德国人的他在德国却不受欢迎,他身心俱疲,次年迁居特拉维夫. 因为缺乏生活来源,他的生活极端贫困,甚至到了被迫出售他心爱的学术书籍的地步. 66 岁生日那天,他静静地离开了人世.

4.2 Hermite 变换与 Hermite 矩阵

单从变换的角度,我们很难把 Hermite 变换(对称变换)与正规变换联系起来,但矩阵即变换,从 Hermite 矩阵(对称矩阵)的定义,或者从 Hermite 矩阵(对称矩阵) 都可对角化上却能找到两者的关联,这似乎可以作为数学的"奇异美"的一个例证.

4.2.1 Hermite 变换(Hermite 矩阵)的定义和性质

我们知道,实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足关系式 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=A$, 推广到酉空间 $\mathbb{C}^{n\times n}$, 相应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为 Hermite 矩阵,它满足关系式 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$, 既然矩阵即变换,那么 Hermite 矩阵以及实对称矩阵与什么样的变换对应呢?

设 $\mathcal{T}$ 在酉空间 $\boldsymbol{V}$ 的一组标准正交基 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}$, 且 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$. 任取 $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}\in\boldsymbol{V}$, 令 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)x$, $\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\boldsymbol{y}$, 则

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\boldsymbol{Ax},\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\boldsymbol{Ay}$$

显然要考虑内积 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})$ 和 $(\boldsymbol{\alpha},(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))$, 这样才有可能出现等式. 事实上,由 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$ 可知

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}=(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{Ay})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{\alpha},(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))$$

定义 4.2.1 设 $\mathcal{T}$ 是酉空间 $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换,如果对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\boldsymbol{V}$, 都有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})=(\boldsymbol{\alpha},(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})) \tag{4.2.1}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 $\boldsymbol{V}$ 上的 **Hermite 变换**(Hermite transformation)或**自伴变换**(self-adjoint transformation), 并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵为 **Hermite 矩阵**(Hermite matrix).

定义 4.2.2 设 $\mathcal{T}$ 是欧氏空间 $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换,如果对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\boldsymbol{V}$, 都有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})=(\boldsymbol{\alpha},(\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta})) \tag{4.2.2}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 $\boldsymbol{V}$ 上的**对称变换**(symmetric transformation),并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵为**对称矩阵**(symmetric matrix).

定理 4.2.1 酉空间(或欧氏空间) $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换 $\mathcal{T}$ 是 Hermite 变换(对称变换)的充要条件是 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A})$.

证明: 充分性的证明前已给出,下证必要性.

设 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的一组标准正交基 $\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})$. 由于

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_i),\boldsymbol{\varepsilon}_j)=(a_{1i}\boldsymbol{\varepsilon}_1+a_{2i}\boldsymbol{\varepsilon}_2+\cdots+a_{ni}\boldsymbol{\varepsilon}_n,\boldsymbol{\varepsilon}_j)=a_{ji},(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_j),\boldsymbol{\varepsilon}_i)=a_{ij}$$

所以 $a_{ji}=(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_i),\boldsymbol{\varepsilon}_j)=(\boldsymbol{\varepsilon}_i,\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_j))=\overline{(\mathcal{T}(\boldsymbol{\varepsilon}_j),\boldsymbol{\varepsilon}_i)}=\bar{a}_{ij}$，从而 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$. 证毕.

例 4.2.1　**(方阵的 Cartesian 分解)** 任意复方阵 $\boldsymbol{A}$ 可分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}_1+i\boldsymbol{H}_2$，其中 $\boldsymbol{H}_1,\boldsymbol{H}_2$ 都是 Hermite 矩阵.

显然 $i\boldsymbol{H}_2$ 满足 $(i\boldsymbol{H}_2)^{\mathrm{H}}=-i\boldsymbol{H}_2^{\mathrm{H}}=-i\boldsymbol{H}_2$，即 $i\boldsymbol{H}_2$ 是反 Hermite 矩阵，因此 Cartesian 分解说的是任意复矩阵可分解为一个 Hermite 矩阵与一个反 Hermite 矩阵之和. 与之对应的，则是任意实矩阵可分解为一个对称矩阵与一个反对称矩阵之和. 再特殊到实函数，就是任意实函数可分解为一个奇函数与一个偶函数之和.

定义 4.2.3　设 $\mathcal{T}$ 是酉空间 $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换，如果对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\boldsymbol{V}$，都有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})=-(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))\tag{4.2.3}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 $\boldsymbol{V}$ 上的**反 Hermite 变换**(anti-Hermitian transformation)**或斜 Hermite 变换**(skew-Hermitian transformation)**或斜自伴变换**(skew self-adjoint transformation)，并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵为**反 Hermite 矩阵**(anti-Hermitian matrix)**或斜 Hermite 矩阵**(skew-Hermitian matrix).

定义 4.2.4　设 $\mathcal{T}$ 是欧氏空间 $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换，如果对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in\boldsymbol{V}$，都有

$$(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\beta})=-(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))\tag{4.2.4}$$

则称 $\mathcal{T}$ 为 $\boldsymbol{V}$ 上的**反对称变换**(anti-symmetric transformation)，并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵为**反对称矩阵**(anti-symmetric matrix).

类似 Hermite 变换(对称变换)的情形，可以证明下面的定理：

定理 4.2.2　酉空间(或欧氏空间) $\boldsymbol{V}$ 上的线性变换 $\mathcal{T}$ 是反 Hermite 变换(反对称变换)的充要条件是 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A})$.

作为特殊的正规矩阵，Hermite 矩阵自然具有正规矩阵的一些性质. 同时，作为实对称矩阵的类似物，Hermite 矩阵也同样具有许多和实对称矩阵类似的性质.

定理 4.2.3　正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵的充要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全是实数，即 $\boldsymbol{A}$ 酉相似于实对角矩阵.

证明：充分性. 因为 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵，故有谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，这里 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角元是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值. 由于 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全是实数，所以 $\boldsymbol{\Lambda}=\overline{\boldsymbol{\Lambda}}$，从而 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\overline{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$.

必要性. 因为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，又 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，所以 $\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\overline{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$，从而 $\boldsymbol{\Lambda}=\overline{\boldsymbol{\Lambda}}$，即 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角元全是实数. 证毕.

由此定理易知，Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有与正规矩阵类似的谱分解

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{-1}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}\tag{4.2.5}$$

只是其中的矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 是实对角矩阵而已. 同样地，Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 也具有谱分解表达式 (4.1.7)，只是其中的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 都是实数.

对于反 Hermite 矩阵，显然存在类似结果.

定理 4.2.4　正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是反 Hermite 矩阵的充要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全是纯虚数，即 $\boldsymbol{A}$ 酉相似于对角元为纯虚数的对角矩阵.

由定理 4.2.3 可知，当 Hermite 矩阵特殊为实对称矩阵时，实对称矩阵的特征值也

全是实数. 结合线性代数知识,我们知道此时酉相似已特殊为正交相似,酉相似矩阵已特殊为正交相似矩阵,即实对称矩阵的特征向量全部为实特征向量. 这是实对称矩阵与 Hermite 矩阵的一个重大区别.

定理 4.2.5 实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 正交相似于实对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$,这里 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角元是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,正交相似矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的列向量是相应的单位特征向量.

证明: 类似于 Schur 引理的证明,对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的阶数 n 做归纳法.

当 $n=1$ 时定理显然成立. 设当 $n=k-1$ 时定理成立,考虑当 $n=k$ 时的情形.

设 λ_1 为 k 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值. 显然 λ_1 是实数. 由于 $\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I}$ 是实矩阵且 $|\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I}|=0$,因此线性方程组 $(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 有非零解 $\boldsymbol{q}_1$,而且 $\boldsymbol{q}_1$ 是单位列向量. 显然 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_1=\lambda_1\boldsymbol{q}_1$. 将 $\boldsymbol{q}_1$ 扩充成 $\mathbb{R}^k$ 的一组标准正交基 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k$,令 $\boldsymbol{Q}_1=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k)$,显然 $\boldsymbol{Q}_1$ 是 k 阶正交矩阵,并且

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_k)=(\lambda_1\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_k)$$

由于 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k$ 是 $\mathbb{R}^k$ 的一组标准正交基,所以 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i=\sum_{j=1}^{k}a_{ij}\boldsymbol{q}_j\ (i=2,3,\cdots,k)$. 因此

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k)\begin{pmatrix}\lambda_1 & \boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}$$

此即 $\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}$,其中 $\boldsymbol{\alpha}=(a_{21},a_{31},\cdots,a_{k1})$,$\boldsymbol{A}_1=(a_{st})\ (s,t=2,3,\cdots,k)$ 为 $k-1$ 阶实矩阵. 由于 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$,因此

$$\begin{pmatrix}\lambda_1 & \boldsymbol{\alpha}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}=\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1=\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1=(\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1)^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}$$

这说明 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{0}$,且 $\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}_1$,即 $\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1$ 也是实对称矩阵.

由于 $\boldsymbol{A}_1$ 是 $k-1$ 阶实对称矩阵,根据归纳假设,存在 $k-1$ 阶正交矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2$ 和 $k-1$ 阶对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_1$,使得 $\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2=\boldsymbol{\Lambda}_1$. 令 $\boldsymbol{Q}_2=\mathrm{diag}(1,\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2)$,$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{Q}_2$,易证 $\boldsymbol{Q}$ 是 k 阶正交矩阵,从而

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{Q}_2=\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_1\begin{pmatrix}\lambda_1 & \\ & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\boldsymbol{Q}_2=\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{H}}\begin{pmatrix}\lambda_1 & \\ & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\boldsymbol{Q}_2$$

$$=\begin{pmatrix}1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{Q}}_2^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1 & \\ & \boldsymbol{A}_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{Q}}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{Q}}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\widetilde{\boldsymbol{Q}}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & \\ & \boldsymbol{\Lambda}_1\end{pmatrix}\equiv\boldsymbol{\Lambda}.$$ 证毕.

由此定理易知,实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解或谱分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \tag{4.2.6}$$

令正交矩阵 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n)$,实对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$,则式(4.2.6)

可改写为

$$\boldsymbol{A}=\lambda_1\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}+\lambda_2\boldsymbol{q}_2\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}+\cdots+\lambda_1\boldsymbol{q}_n\boldsymbol{q}_n^{\mathrm{T}} \tag{4.2.7}$$

此即实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**特征值分解表达式或谱分解表达式.**

对于反对称矩阵,却不完全有类似结果.

定理 4.2.6　反对称矩阵的特征值全是纯虚数.

但是在正交相似下,反对称矩阵的标准型却未必是对角矩阵. 详见 4.6.1 小节.

例 4.2.2　**(Cayley 变换)**若实方阵 $\boldsymbol{A}$ 是反对称矩阵,那么 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A}$ 是非奇异的,并且 Cayley 变换矩阵 $\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}$ 是正交矩阵.

证明:对任意的 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$, 由于二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为实数,并注意到 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A}$, 故可得

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

此即 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=0$

对于方程组 $(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$, 由于 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=0$, 因此 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$, 即方程组只有零解,从而 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A}$ 是非奇异的.

由于 $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})$, 所以 $\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})$, 从而

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}&=[(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-T}\\&=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})[(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}}]^{-1}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}\end{aligned}$$

由此显然可推出 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$. 证毕.

4.2.2　达到教育的目的是用头脑,又不是用脚

埃尔米特(Charles Hermite,见图 4-2)是 19 世纪最伟大的代数几何学家,研究领域涉及数论、二次型、不变量理论、正交多项式、椭圆函数等许多领域,Hermite 矩阵、Hermite 标准型(即行阶梯矩阵 $\boldsymbol{H}_A$)、Hermite 插值、Hermite 多项式、Hermite 算子、三次 Hermite 样条曲线……数学中有很多以他的名字命名的东西. 他在巴黎高师和巴黎大学执教的 20 余年里,训练了整整一代卓越的法国数学家,包括博雷尔(Emile Borel,1871—1956,测度论的创始人之一,在数学分析中贡献了有限覆盖定理)、达布(Jean-Gaston Darboux,1842—1917,发展了微分几何中的活动标架法,贡献了数学分析中的达布定理、达布积分等结论),当然,他最著名的学生是庞加莱(Henri Poincaré,1854—1912,19 世纪后四分之一和 20 世纪初的领袖数学家,相对论的先驱,创立代数拓扑学,以庞加莱猜想而闻名).



图 4-2　埃尔米特(1822—1901)

如此数学天才,可是数学考试却是他一生的恶梦. 老师惩罚他,用木条打他的脚(他天生跛脚,需借力于拐杖),他恨死了,后来写道:"达到教育的目的是用头脑,又不是用

脚. 打脚有什么用? 打脚可以使人头脑更聪明吗?"他的数学特别好,是因为他花了许多时间去看牛顿、高斯等数学大师的原著. 他认为只有在那里才能找到"数学的美,是回到基本点的辩论,那里才能饮到数学兴奋的源头". 后来他转入了伽罗瓦的母校,并且数学老师都是理查德(Louis Richard). 好心的理查德老师 15 年前没能拯救天才伽罗瓦,如今遇到这位"年轻的拉格朗日",自然极力鼓励. 因此尽管大学入学考试埃尔米特重考了五次,屡败屡战,但他最终还是进入了巴黎综合理工学院,即 X. 可是一年后(1843 年)却因他的跛脚被校方退学. 好在他结识了刘维尔(Joseph Liouville,1809—1882,贡献了复变函数中的刘维尔定理等结论,创办了《纯粹与应用数学杂志》,并于 1846 年发表了伽罗瓦的部分遗稿),并经刘维尔推荐与雅可比(详见 6. 6. 5 小节)通信. 1848 年起,他被任命为 X 的助教和招生考官(估计是许多伯乐们努力的结果). 1856 年,他入选法国科学院院士,六年后被 X 提升为为他而特设的讲师. 1869 年起,他担任 X 和巴黎大学的教授.

埃尔米特在不变量方面有较多成果,以致于西尔维斯特曾指出,"凯莱、埃尔米特和我组成了一个不变量的三位一体". 他深入研究了 Hermite 二次型,并于 1855 年创立了 Hermite 变换理论,这是关于对称的理论. 或许我们可以说,正因为自己的"不对称",埃尔米特才能深刻地理解并驯服对称之美.

4. 2. 3 正定 Hermite 矩阵

在线性代数中,实对称矩阵常与实二次型紧密联系在一起. 下面我们先将实二次型推广到复二次型,即 Hermite 二次型.

定义 4. 2. 5 称 n 个复变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 和它们的共轭变量 $\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_n$ 之间的复系数二次齐次复多项式

$$f(x_1,\cdots,x_n)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}\bar{x}_i x_j,\ \ \bar{a}_{ij}=a_{ji} \tag{4.2.8}$$

为 **Hermite 二次型**(Hermite quadratic form)或**复二次型**(complex quadratic form),记为

$$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}A\boldsymbol{x} \tag{4.2.9}$$

这里 $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{H}}$, 并且称矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})$ 为此二次型的矩阵.

由定义显然可知矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵. 一个 Hermite 矩阵与一个 Hermite 二次型对应,正如一个实对称矩阵与一个实二次型对应. 实二次型可通过正交变换化成标准型,Hermite 二次型也具有类似的性质.

定理 4. 2. 7 对于 Hermite 二次型 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, 存在酉变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}$, 可将之化为标准形

$$f(\boldsymbol{x})=\lambda_1\bar{y}_1y_1+\lambda_2\bar{y}_2y_2+\cdots+\lambda_n\bar{y}_ny_n \tag{4.2.10}$$

其中 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{H}}$, 且实数 λ_j 是 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值.

证明:此定理显然是用 Hermite 二次型语言叙述了谱分解表达式 (4. 2. 5). 证毕.

定理 4. 2. 8 (惯性定理)对于 Hermite 二次型 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, 存在可逆的线性变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$, 可将之化成规范形

$$f(\boldsymbol{x})=\bar{y}_1y_1+\cdots+\bar{y}_py_p-\bar{y}_{p+1}y_{p+1}-\cdots-\bar{y}_ry_r \tag{4.2.11}$$

其中 r 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩，且 p 由 $\boldsymbol{A}$ 唯一确定.

证明：略.

我们分别称式(4.2.11)中的正项个数 p 和负项个数 $r-p$ 为 Hermite 二次型的**正惯性指数**(positive index of inertia)和**负惯性指数**(negative index of inertia).

因为正惯性指数 p 与秩 r 之间满足 $0\leqslant p\leqslant r\leqslant n$，所以 Hermite 二次型可分为五种情况：

(1)当 $p=r=n$ 时，规范形为 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\bar{y}_i y_i=\sum_{i=1}^{n}|y_i|^2$，显然当 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}$，故 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}>0$；

(2)当 $p=r<n$ 时，规范形为 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{r}|y_i|^2$，故对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geqslant 0$；

(3)当 $p=0$ 且 $r=n$ 时，规范形为 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=-\sum_{i=1}^{n}|y_i|^2$，显然当 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}$，故 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}<0$；

(4)当 $p=0$ 且 $r<n$ 时，规范形为 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=-\sum_{i=1}^{r}|y_i|^2$，显然对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，都有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leqslant 0$；

(5)当 $0<p<r\leqslant n$ 时，规范形为 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{p}|y_i|^2-\sum_{i=p+1}^{r}|y_i|^2$，对不同的 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的取值可以大于0、小于0或等于0.

根据上面的讨论，我们可将 Hermite 二次型分类如下：

定义 4.2.6 设有 Hermite 二次型 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$.

(1)如果对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}>0$；当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=0$，则称 Hermite 二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**正定的**(positive definite)，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**正定 Hermite 矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}>0$；

(2)如果对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geqslant 0$，则称 Hermite 二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**半正定的**(semi-positive definite)，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**半正定 Hermite 矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}\geqslant 0$；

(3)如果对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}<0$；当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=0$，则称 Hermite 二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**负定的**(negative definite)，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**负定 Hermite 矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}<0$；

(4)如果对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leqslant 0$，则称 Hermite 二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**半负定的**(semi-negative definite)，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**半负定 Hermite 矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}\leqslant 0$；

(5)如果对不同的 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 有时为正，有时为负，有时又为0，则称 Hermite 二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**不定的**(undefinite)，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**不定 Hermite 矩阵**.

对于实二次型，类似的分类如下：

定义 4.2.7 设有实二次型 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$.

(1)如果对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}>0$；当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=0$，则称实二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**正定的**，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**正定矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}>0$；

(2)如果对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\geqslant 0$，则称实二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**半正定的**，对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**半正定矩阵**，记为 $\boldsymbol{A}\geqslant 0$；

(3)如果对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}<0$；当且仅当 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 时 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=0$，则称实

二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**负定的**,对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**负定矩阵**,记为 $\boldsymbol{A}<0$;

(4)如果对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$,恒有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leqslant 0$,则称实二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**半负定的**,对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**半负定矩阵**,记为 $\boldsymbol{A}\leqslant 0$;

(5)如果对不同的 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$,$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 有时为正,有时为负,有时又为 0,则称实二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为**不定的**,对应的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为**不定矩阵**.

矩阵即变换,那么上述矩阵对应什么样的变换呢?考虑到 Hermite 变换要考察向量的像与原像的内积,而正定性则要求向量的长度非负,因此我们要考察的是 $(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))$ 的值.

定义 4.2.8　设 $\mathcal{T}$ 是酉空间 $\boldsymbol{V}$ 上的 Hermite 变换,如果对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{\alpha}\in\boldsymbol{V}$,都有

$$(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))>0\quad((\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))\geqslant 0)$$

则称 $\mathcal{T}$ 为酉空间 $\boldsymbol{V}$ 上的**正定变换(半正定变换)**,记作 $\mathcal{T}>0$($\mathcal{T}\geqslant 0$),并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为正定 Hermite 矩阵(半正定 Hermite 矩阵).

对 $\boldsymbol{\theta}\neq\boldsymbol{\alpha}\in\boldsymbol{V}$,设 $\boldsymbol{\alpha}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的一组标准正交基下的坐标为 x,则 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$ 在这组标准正交基下的坐标为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$,注意到定理 4.2.1 已证得 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$,从而

$$(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\tag{4.2.12}$$

因此定义 4.2.8 与定义 4.2.6 是一致的.

定义 4.2.9　设 $\mathcal{T}$ 是欧氏空间 $\boldsymbol{V}$ 上的对称变换,如果对任意 $\boldsymbol{\theta}\neq\boldsymbol{\alpha}\in\boldsymbol{V}$,都有

$$(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))>0\quad((\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))\geqslant 0)$$

则称 $\mathcal{T}$ 为欧氏空间 V 上的**正定变换(半正定变换)**,记作 $\mathcal{T}>0$($\mathcal{T}\geqslant 0$),并称 $\mathcal{T}$ 在 $\boldsymbol{V}$ 的任意一组标准正交基下的矩阵为正定对称矩阵(半正定对称矩阵).

易证正定(半正定)矩阵具有下列性质:

(1)单位矩阵 $\boldsymbol{I}>0$,同时也有 $\boldsymbol{I}\geqslant 0$(这显然就是内积的正性);

(2)若 $\boldsymbol{A}>0$ 且 $\boldsymbol{B}>0$,则 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}>0$ 且 $k\boldsymbol{A}>0$(k 为任意正数);

(3)若 $\boldsymbol{A}\geqslant 0$ 且 $\boldsymbol{B}\geqslant 0$,则 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\geqslant 0$.

正定矩阵还具有下列性质:

定理 4.2.9　对 n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$,下列命题是等价的:

(1) $\boldsymbol{A}$ 是正定的;

(2) 对任意 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 都是正定 Hermite 矩阵;

(3) $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征值全是正数;

(4) 存在 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$,使得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$;

(5) 存在 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$;

(6) 存在 n 阶可逆 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{H}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}^2$.

证明:首先按照(1)⇒(2)⇒(3)⇒(4)⇒(5)⇒(1)的路线来证明.

(1)⇒(2). 易证 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 是 Hermite 矩阵. 记 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$,则对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$,可知 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$,再由(1)可得 $(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{y})>0$,此时 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{P}\boldsymbol{x},\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{y})>0$,因此由式(4.2.10)可知 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 是正定 Hermite 矩阵.

(2)⇒(3). 由 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解式(4.2.5)可得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,$

λ_n). 注意到酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 满足(2)中 $\boldsymbol{P}$ 的要求,故可知 $\boldsymbol{A}$ 是正定矩阵,即对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$,有 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Lambda x})>0$,取 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}_j\ (j=1,2,\cdots,n)$ 即单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 的第 j 列,则 $\lambda_j=(\boldsymbol{e}_j,\boldsymbol{\Lambda e}_j)>0$,即 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全为正数.

(3) ⇒ (4). 对 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$, 有 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}=\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$. 由于 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 均为正数,故令 $\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}=\mathrm{diag}(1/\sqrt{\lambda_1},1/\sqrt{\lambda_2},\cdots,1/\sqrt{\lambda_n})$ 且 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{U\Lambda}^{-1/2}$, 易知 $\boldsymbol{P}$ 是可逆矩阵,从而

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}=(\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU\Lambda}^{-1/2}=\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\boldsymbol{\Lambda\Lambda}^{-1/2}=\boldsymbol{I}$$

(4) ⇒ (5). 由(4)知存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$, 使得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{I}$, 故令 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{P}^{-1}$, 即得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$.

(5) ⇒ (1). 因为存在可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$, 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$, 因此对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$, 记 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{Qx}$, 显然 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$, 且有 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ax})=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Qx})=(\boldsymbol{Qx},\boldsymbol{Qx})=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})>0$, 此即 $\boldsymbol{A}$ 是正定矩阵.

下面证明(1) ⇒ (6)和(6) ⇒ (1).

(1) ⇒ (6). 因为 $\boldsymbol{A}$ 是正定 Hermite 矩阵,所以 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$, 其中 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$ 的对角元全为正数. 令 $\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}=\mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1},\sqrt{\lambda_2},\cdots,\sqrt{\lambda_n})$, $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{U\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$, 易证 $\boldsymbol{H}$ 是可逆的 Hermite 矩阵,且

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{I\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{U\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})=\boldsymbol{H}^2$$

(6) ⇒ (1). 因为存在可逆 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{H}$, 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}^2=\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}$, 因此类似于(5) ⇒ (1)即知 $\boldsymbol{A}$ 是正定矩阵. 证毕.

对于半正定矩阵,也可证明类似的性质.

定理 4.2.10　对 n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$, 下列命题是等价的:

(1) $\boldsymbol{A}$ 是半正定的;

(2) 对任意 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}$ 都是半正定 Hermite 矩阵;

(3) $\boldsymbol{A}$ 的特征值全是非负实数;

(4) 存在 n 阶可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$, 使得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$, 这里 r 为 $\boldsymbol{A}$ 的秩;

(5) 存在秩为 r 的 n 阶矩阵 $\boldsymbol{Q}$, 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$;

(6) 存在 n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{H}$, 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}^2$.

例 4.2.3　对 n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$, 证明:

(1)若 $\boldsymbol{A}>0$ 是正定的,则 $\boldsymbol{A}^{-1}>0$ 且 $|\boldsymbol{A}|>0$;(2)若 $\boldsymbol{A}$ 是半正定的,则 $|\boldsymbol{A}|\geqslant 0$.

证明:(1)设 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$, 由于 $\boldsymbol{A}>0$, 由定理 4.2.9 可知 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 均为正数,因此 $\lambda_1^{-1},\lambda_2^{-1},\cdots,\lambda_n^{-1}$ 也均为正数,再由定理 4.2.9 可知 $\boldsymbol{A}^{-1}>0$, 且 $|\boldsymbol{A}|=\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n>0$.

(2)证明与(1)类似. 证毕.

定理 4.2.11　**(块对角 Hermite 矩阵)** 对 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}_1\in\mathbb{C}^{k\times k}$ 及 $\boldsymbol{A}_2\in\mathbb{C}^{(n-k)\times(n-k)}$, 令 $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2)$. 证明 $\boldsymbol{A}>0$ 当且仅当 $\boldsymbol{A}_1>0$ 且 $\boldsymbol{A}_2>0$.

证明:若 $\boldsymbol{A}>0$, 则对任意 $\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^k$, 令 $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{0}\end{pmatrix}\in\mathbb{C}^n$, 显然 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$, 因此 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y}$

$= \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$，即 $\boldsymbol{A}_1 > 0$. 同理可证 $\boldsymbol{A}_2 > 0$.

反之，对任意 $\boldsymbol{0} \neq \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^n$，由 $\boldsymbol{A}_1 > 0$ 且 $\boldsymbol{A}_2 > 0$ 可知，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y} \geqslant 0$ 且 $\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{z} \geqslant 0$，而且 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{z}$ 不同时为零（否则 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ 且 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$ 从而 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$），从而

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}, \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}) \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \\ & \boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{pmatrix} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{z} > 0$$

此即 $\boldsymbol{A} > 0$. 证毕.

例 4.2.4　(**Schur 补**)设 n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 被分块为 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{12}^{\boldsymbol{H}} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix}$，其中 $\boldsymbol{A}_{11} \in \mathbb{C}^{k\times k}$，则 $\boldsymbol{A} > 0$ 的充要条件是 $\boldsymbol{A}_{11} > 0$ 且其 Schur 补 $[\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}] > 0$，这里 $[\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}] = \boldsymbol{A}_{22} - \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12}$.

证明：若 $\boldsymbol{A} > 0$，类似于定理 4.2.11，易知 $\boldsymbol{A}_{11} > 0$ 且 $[\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}] > 0$.

反之，当 $\boldsymbol{A}_{11} > 0$ 且 $[\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}] > 0$ 时，由定理 4.2.11 可知 $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{A}_{11}, [\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}]) > 0$. 又由第 1 章的式 (1.2.13) 可知

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_k & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{11}^{-1} & \boldsymbol{I}_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & [\boldsymbol{A}/\boldsymbol{A}_{11}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_k & \boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{n-k} \end{pmatrix} \tag{4.2.13}$$

记 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_k & \boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{n-k} \end{pmatrix}$，显然 $\boldsymbol{P}$ 可逆，由于 $(\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}_{11}^{-1})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}_{11}^{\mathrm{H}})^{-1} = \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}$（因为 $\boldsymbol{A}_{11} > 0$），则 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_k & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{11}^{-1} & \boldsymbol{I}_{n-k} \end{pmatrix}$，从而式 (4.2.13) 即为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}$. 再由定理 4.2.9 可知 $\boldsymbol{A} > 0$. 证毕.

判定实正定矩阵的 Sylvester 定理也可以推广到正定 Hermite 矩阵.

定理 4.2.12　(**Sylvester 定理**) n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A} > 0$ 的充要条件是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式皆为正数，即 $D_1 > 0, D_2 > 0, \cdots, D_n > 0$. 这里

$$D_k = |\boldsymbol{A}_k| \equiv \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \quad (k = 1, 2, \cdots, n)$$

推论　n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A} < 0$ 的充要条件是 $(-1)^k D_k = |-\boldsymbol{A}_k| > 0\ (k = 1, 2, \cdots, n)$.

式 (4.2.13) 向我们暗示了实对称正定矩阵的 Cholesky 分解也可推广到正定 Hermite 矩阵.

定理 4.2.13　(**Cholesky 分解定理**) n 阶 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A} > 0$ 的充要条件是存在非奇异的下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}} \tag{4.2.14}$$

我们称式 (4.2.14) 为正定 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Cholesky 分解.

证明:充分性由定理 4.2.9 即得. 下证必要性.

由定理 4.2.9 可知 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$, 这里 $\boldsymbol{Q}$ 为可逆矩阵. 由 3.6 节可知,可逆的复矩阵存在 UR 分解. 设矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的 UR 分解为 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$, 这里 $\boldsymbol{U}_1$ 为酉矩阵, $\boldsymbol{R}$ 为对角元为正数的上三角矩阵,则

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$$

令 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}$, 则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$. 证毕.

可以证明,Cholesky 分解式 (4.2.14) 中的 $\boldsymbol{L}$ 是唯一的.

4.2.4　对称:是可怕的还是可爱的?

提到对称,人们可能更多地联想到艺术,因此对称性常与平衡、形状、形式、空间等一同被讨论. 尽管从静态表现上理解对称性,有一定意义,但更重要的应该是从操作意义上、从生成过程上理解对称性.

"可怕的对称"是徐一鸿(Anthony Zee)原题为 *Fearful Symmetry* 的科普书的译名译成"可畏的对称"更妥,这在清华大学出版社的新译本中得以更正. 在该书中,徐一鸿从美感和哲学的高度总结物理学,把当代物理学总结为对称性和最小作用原理. 事实上,在物理学中,对称性是指某种操作下的不变性或者守恒性,常与守恒定律相联系. 比如与空间平移不变性对应的是动量守恒定律,与时间平移不变性对应的是能量守恒定律,与旋转变换不变性对应的是角动量守恒,与空间反射(镜像)操作不变性对应的是宇称守恒. 麦克斯韦(James Clerk Maxwell,1831—1879,创立了经典电动力学和光的电磁说)提出的方程组可谓对称性在物理中的典型应用. 当时,他用数学方法分析、整理并推广了法拉第(Michael Faraday,1791—1867,提出了电磁感应学说)的思想,把电磁学中的一系列基本定律表示成著名的麦克斯韦方程组:

$$\begin{cases}\mathrm{Div}\vec{E}=Q & (4.2.15)\\ \mathrm{Div}\vec{H}=0 & (4.2.16)\\ \mathrm{Rot}\vec{E}=-\dfrac{1}{c}\cdot\dfrac{\partial\vec{H}}{\partial t} & (4.2.17)\\ \mathrm{Rot}\vec{H}=\dfrac{1}{c}\cdot\dfrac{\partial\vec{E}}{\partial t}+\dfrac{1}{c}\vec{j} & (4.2.18)\end{cases}$$

其中,方程 (4.2.15) 相当于库仑定律,表示电场强度 $\vec{E}$ 的散度等于闭合体内所含总电量 Q; 方程 (4.2.16) 表示磁场强度 $\vec{H}$ 的散度为零,这是由磁力线的封闭性所决定的;方程 (4.2.17) 表明电场强度 $\vec{E}$ 的旋度正比于磁场强度 $\vec{H}$ 对时间 t 的变化率. 这三个方程都是根据实验结果总结出来的,并且方程 (4.2.15) 与方程 (4.2.16) 对称;显然,如果没有方程 (4.2.18),方程 (4.2.17) 就形单影只了. 因此从对称性考虑,麦克斯韦大胆地假设了方程 (4.2.18) 的存在,这意味着电场的变化也能产生磁场. 据此,麦克斯韦预言了电磁波的存在,这个预言 30 年后被实验证实.

与之相应的是，化学家眼中的对称性则是“可爱的”. 对称性甚至成了结构化学的基础. 有人从分子的对称性、晶体的对称性、轨道及波函数的对称性等侧面总结了化学中的对称性. 分子的对称性最直观，比如苯的环形结构(见图 4－3)、DNA 的双螺旋结构、C60 的足球结构(见图 4－4). 当然，我们也别忘了手性分子(见图 4－5). 晶体的对称性则涉及 3 维空间，如氯化钠即食盐的晶体结构(见图 4－6). 从原子轨道的角度分布看，S 轨道是球形的，P 轨道是中心反对称的，d 轨道则是中心对称的. 由原子轨道组成的分子轨道，按键轴则呈圆柱形对称(σ 对称性)，按通过键轴的节面则呈反对称(π 对称性). 至于波函数的对称性，则依赖于全同粒子系中粒子的不可分辨性，这使得交换粒子坐标前后所得的结果应该描述的是同样的状态，即相应的波函数满足

$$|\varphi(1,2,3,\cdots,N)|^2=|\varphi(2,1,3,\cdots,N)|^2 \text{ 且 } \varphi(1,2,3,\cdots,N)=\pm\varphi(2,1,3,\cdots,N)$$

这样的波函数要么是对称的(即满足 $\varphi(1,2,3,\cdots,N)=\varphi(2,1,3,\cdots,N)$)，要么是反对称的(即满足 $\varphi(1,2,3,\cdots,N)=-\varphi(2,1,3,\cdots,N)$).

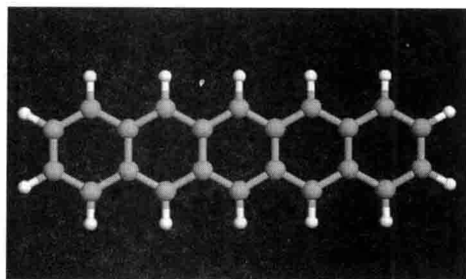


图 4－3　并五苯分子的结构示意图

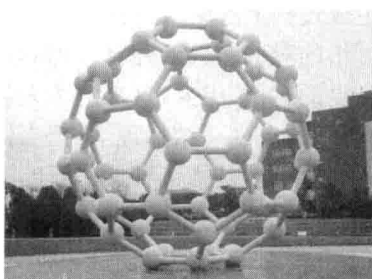


图 4－4　足球烯雕塑



图 4－5　手性雕塑

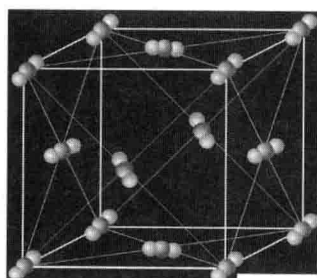


图 4－6　氯化钠晶体结构示意图

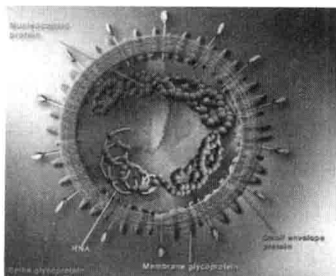


图 4－7　SARS 病毒

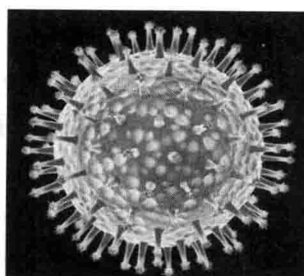


图 4－8　H7N9 病毒

对称不仅与美丽有关，而且也与丑陋相伴，如 SARS 病毒（见图 4－7）、H7N9 病毒（见图 4－8），都有着对称的“美丽”外衣. 想想这也情有可原，因为如果对称性是宇宙的本质属性的话，那万物无论美丑，自然都会得其春风雨露，毕竟万物皆平等.

至于数学中的对称性，或许让外尔（Hermann Weyl，1885—1955，20 世纪上半叶最重要的数学家之一，主要成就在黎曼曲面和群论上）来说更合适. 在著名的“小册子”（薄薄 170 页）《对称》中，他分四讲阐述了对称这个深刻主题. 在第一讲中，他开宗明义，将对称性视为优美和谐. 然后，他从最简单的双侧对称性入手，通过大量艺术图片、人体的心脏和晶体的旋光性等生动的例子，结合前人的一些哲学思考，间或伴以反射变换、自同构等数学思想，引领读者深入思考对称. 接下来在第二讲中，他首先引入群论的基本概念，并以之考察了平移对称性、旋转对称性，饰带、官邸、芽枝、蜈蚣、音乐的节律、花瓶、宫殿的屋顶、教堂、水母、雪花、鹦鹉螺、向日葵……各种有趣的例子琳琅满目，最后给出了 3 维中的全部有限旋转群的完整表. 第三讲中，他系统处理了更加复杂的装饰对称性或晶体对称性，并将之与叠合变换（即全等变换）的不连续群联系起来. 最终，在第四讲里，他表明了“对称性原理在性质更为基本的多的一些物理和数学问题中也是起作用的”，并将之前的所有应用上升到“对于该原理本身的一个最终的一般陈述”，也就是伽罗瓦群.

拉格朗日在创立了分析力学后，不无遗憾地说：“牛顿是最幸运的，因为宇宙的结构只能被发现一次.”他比牛顿晚出生，只能空自嗟叹. 可他却是伽罗瓦的前辈，而且在他的《方程代数解之反思》（1771 年）中，还引入了方程根“置换”的思想，这可是群论的萌芽. 不过最终揭开对称性之奥秘的，却是他离世时刚刚 2 岁的伽罗瓦.

4.3 投影变换与投影矩阵

正交投影和斜投影应用领域广泛. 比如在无线通信、雷达、时间序列分析和信号处理等领域中，经常需要提取某个所需要的信号，同时过滤掉所有干扰或噪声. 这就仿佛拍照：我们留下了二维的平面影像，但也抛弃了第三个维度. 从哲学本质看，就是丢掉次要因素和次要矛盾，紧紧抓住问题的主要矛盾. 显然这与拉格朗日乘子法增加空间维数的提升手法正好相反. 在大规模计算中，更需要通过投影方法将高维问题降维为低维问题，以降低计算量.

定义 4.3.1　若酉空间（欧氏空间）V 有直和分解 $V=V_1\oplus V_2$，即对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$ 有直和分解

$$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2\quad(\boldsymbol{\alpha}_1\in V_1,\boldsymbol{\alpha}_2\in V_2)\tag{4.3.1}$$

则称线性变换

$$\mathcal{P}:\boldsymbol{\alpha}\mapsto\boldsymbol{\alpha}_1\tag{4.3.2}$$

是 V 沿 V_2 到 V_1 的**斜投影变换**（oblique projection transformation），称 $\mathcal{P}$ 在任意一组基下的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为**投影矩阵**（projection matrix）. $\mathcal{P}$ 常被简称为**投影变换**或**投影算子**（projector）.

特别地，当 V_1 与 V_2 正交，即 $V_2=V_1^{\perp}$ 时，称线性变换 $\mathcal{P}$ 为**正交投影变换**（orthogonal projection transformation）或**正交投影算子**（orthogonal projector），相应的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 称为**正交投影矩阵**（orthogonal projection matrix）.

如图 4-9 所示，我们可以想象光线沿 V_2 照向 V_1，这样 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 在 V_1 上的影子就是 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha}_1$. 至于图 4-10 则是光线沿 $V_1^{\perp}$ 照向 V_1，此时 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 在 V_1 上的影子仍然是 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha}_1$. “啊，亲爱的影子！”（电影《巴黎圣母院》台词）

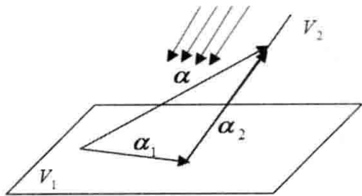


图 4-9 斜投影变换 $\mathcal{P}:\boldsymbol{\alpha} \mapsto \boldsymbol{\alpha}_1$

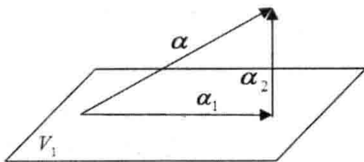


图 4-10 正交投影变换 $\mathcal{P}:\boldsymbol{\alpha} \mapsto \boldsymbol{\alpha}_1$

影子的影子当然是自身，即对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，投影变换 $\mathcal{P}$ 满足：

$$\mathcal{P}^2(\boldsymbol{\alpha}) = \mathcal{P}(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})) = \mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}_1) = \boldsymbol{\alpha}_1 = \mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})$$

也就是 $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$. 反之，可以证明，酉空间（欧氏空间）$V$ 中满足 $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ 的线性变换 $\mathcal{P}$ 肯定是投影变换. 因此投影变换 $\mathcal{P}$ 又被称为**幂等变换**(idempotent transformation).

变换即矩阵，显然投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 应该满足 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$，即 $\boldsymbol{P}$ 是**幂等矩阵**(idempotent matrix).

定理 4.3.1 酉空间（或欧氏空间）V 中的线性变换 $\mathcal{P}$ 是投影变换的充要条件是 $\mathcal{P}$ 在任意一组基下的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 为幂等矩阵.

证明：设 $\mathcal{P}$ 在 V 的一组基 $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{P}$，则

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n) = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}$$

$$\mathcal{P}^2(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n) = \mathcal{P}[(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}] = \mathcal{P}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}^2$$

由于 $\mathcal{P}$ 是投影变换，即 $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$，因此 $(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}^2$，此即 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$.

反之，当 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ 时，若有 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n) = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}$，则

$$\mathcal{P}^2(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n) = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\boldsymbol{P}^2 = (\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)\mathcal{P} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)$$

即 $\mathcal{P}^2(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n) = \mathcal{P}(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n)$，从而 $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$，即 $\mathcal{P}$ 是投影变换. 证毕.

思考：Householder 矩阵是幂等矩阵吗？即 Householder 变换是投影变换吗？

正交投影变换（正交投影矩阵）作为特殊的投影变换（投影矩阵），其特殊性又在何处呢？注意到此时在分解式 (4.3.1) 中，$(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2) = 0$，即 $(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}), \boldsymbol{\alpha}_2) = 0$，因此

$$(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}), \boldsymbol{\alpha}) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_1) \geqslant 0$$

这就是说投影变换 $\mathcal{P}$ 具有半正定变换的性质，当然，缺失的一环是必须证明 $\mathcal{P}$ 是 Hermite 变换或对称变换.

设 $\mathcal{P}$ 为酉空间 V 上的正交投影变换，对任意 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} \in V$，设 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\beta}_2$，这里 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_1 \in V_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_2 \in V_1^{\perp}$，显然有 $(\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_2) = (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1) = 0$，以及 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\alpha}_1, \mathcal{P}(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\beta}_1$，因此

$$(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}), \boldsymbol{\beta}) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\beta}_2) = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\beta}_1) = (\boldsymbol{\alpha}_1 + \boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1) = (\boldsymbol{\alpha}, (\mathcal{P}(\boldsymbol{\beta}))$$

即 $\mathcal{P}$ 是 Hermite 变换.

定理 4.3.2　酉空间(或欧氏空间) V 中的投影变换 $\mathcal{P}$ 是正交投影变换的充要条件是 $\mathcal{P}$ 是 Hermite 变换(对称变换).

证明:必要性前面已证. 下证充分性.

设 $\mathcal{P}$ 在酉空间 V 的一组基 $\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{P}$, 则 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$ 且 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{P}$. 设任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$ 在此基下的坐标向量为 $\boldsymbol{x}$, 并设 $\boldsymbol{\alpha}$ 有直和分解 (4.3.1), 则 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})$ 的坐标向量为 $\boldsymbol{Px}$, 因此

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)&=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha})-(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}),\boldsymbol{\alpha})-(\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}))\\&=(\boldsymbol{Px},\boldsymbol{x})-(\boldsymbol{Px},\boldsymbol{Px})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Px}-(\boldsymbol{Px})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{Px})\\&=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Px}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Px}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^2\boldsymbol{x}=0\end{aligned}$$

从而 $\mathcal{P}$ 是正交投影变换. 证毕.

矩阵即变换. 用矩阵语言改写定理 4.3.2,就得到下面的定理.

定理 4.3.3　酉空间(或欧氏空间) V 中的投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 是正交投影矩阵的充要条件是 $\boldsymbol{P}$ 是 Hermite 矩阵(对称矩阵).

思考: Householder 矩阵是正交投影矩阵吗?

正交投影变换 $\mathcal{P}$ 对应的正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 到底是什么样的矩阵呢?

考虑正交投影变换 $\mathcal{P}:(x_1,x_2)^{\mathrm{T}}\mapsto(x_1,0)^{\mathrm{T}}$, 注意到 $\begin{pmatrix}x_1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}$,

即 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$, 再联想到 $\mathcal{P}$ 的像空间为 $V_1=\{(x_1,0)^{\mathrm{T}},x_1\in\mathbb{R}\}$ 中,不难发现其基 $(1,\boldsymbol{0})^{\mathrm{T}}$ 满足

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1,0)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}$$

这是否意味着 $\mathcal{P}$ 的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 就是由 $\mathcal{P}$ 的像空间的基与其转置相乘而得的矩阵呢?

再看看三维的情形. 设有正交投影变换 $\mathcal{P}:(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}}\mapsto(x_1,x_2,0)^{\mathrm{T}}$. 注意到

$$\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$$

并且确实成立

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}$$

定理 4.3.4　(正交投影变换的矩阵 I) 在酉空间(或欧氏空间) V 中,沿 $V_1^{\perp}$ 到 r 维子空间 V_1 的正交投影变换 $\mathcal{P}$ 在 V 的任意一组标准正交基下的矩阵 $\boldsymbol{P}_{V_1}$ 都可表示为

$$\boldsymbol{P}_{V_1}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\tag{4.3.3}$$

其中，$\boldsymbol{U}_1 \in \mathbb{C}^{n\times r}$ 是半酉矩阵.

证明：设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 为 V_1 的任意一组标准正交基，且 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是 V 的一组标准正交基，则 $\mathcal{P}$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 下的矩阵可表示为

$$\boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix} (\boldsymbol{I}_r \quad \boldsymbol{O})$$

设 $\mathcal{P}$ 在 V 的任意一组标准正交基 $\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{P}_{V_1}$，并且 $\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$ 到 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}$，则 $\boldsymbol{P}$ 是酉矩阵，且 $\boldsymbol{P}_{V_1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}^{-1}$，记 $\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$，显然

$$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1 = (\boldsymbol{I}_r \quad \boldsymbol{O})\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \boldsymbol{I}_r$$

即 $\boldsymbol{U}_1$ 是半酉矩阵，并且

$$\boldsymbol{P}_{V_1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}(\boldsymbol{I}_r \quad \boldsymbol{O})\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}(\boldsymbol{I}_r \quad \boldsymbol{O})\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}$$

证毕.

说明：从上述证明可知，$\boldsymbol{U}_1 \in \mathbb{C}^{n\times r}$ 是标准正交基间的过渡矩阵 $\boldsymbol{P}$ 即酉矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的前 r 列，是半酉矩阵. 由于 $\boldsymbol{P}$ 是任意的酉矩阵，因此 $\boldsymbol{U}_1$ 也是任意的半酉矩阵. 易知式 (4.3.3) 中的矩阵 $\boldsymbol{P}_{V_1}$ 满足 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}$，因此 $\boldsymbol{P}_{V_1}$ 是正交投影矩阵，且由 $\boldsymbol{P}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$ 及 $\boldsymbol{P}_{V_1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}^{-1}$ 知它的特征值为 1 和 0. 若令 $\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_r, \boldsymbol{p}_{r+1}, \cdots, \boldsymbol{p}_n)$，则 $\boldsymbol{U}_1 = (\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_r)$，且

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P}_{V_1} &= \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}} = 1 \cdot \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{H}} + 1 \cdot \boldsymbol{p}_2\boldsymbol{p}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + 1 \cdot \boldsymbol{p}_r\boldsymbol{p}_r^{\mathrm{H}} + 0 \cdot \boldsymbol{p}_{r+1}\boldsymbol{p}_{r+1}^{\mathrm{H}} + \cdots + 0 \cdot \boldsymbol{p}_n\boldsymbol{p}_n^{\mathrm{H}} \\ &\equiv 1 \cdot \boldsymbol{E}_1 + 1 \cdot \boldsymbol{E}_2 + \cdots + 1 \cdot \boldsymbol{E}_r + 0 \cdot \boldsymbol{E}_{r+1} + \cdots + 0 \cdot \boldsymbol{E}_n \\ &= 1 \cdot \boldsymbol{E}_1 + 1 \cdot \boldsymbol{E}_2 + \cdots + 1 \cdot \boldsymbol{E}_r \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

其中，$\boldsymbol{E}_i \equiv \boldsymbol{p}_r\boldsymbol{p}_r^{\mathrm{H}}\ (i = 1,2,\cdots,r)$ 都是秩 1 矩阵. 式 (4.3.3) 和式 (4.3.4) 也可看成**正交投影矩阵的谱分解**.

如果仅仅知道列满秩矩阵 $\boldsymbol{W} \in \mathbb{C}^{n\times r}$，根据复矩阵的 UR 分解可知，存在半酉矩阵 $\boldsymbol{U}_1 \in \mathbb{C}^{n\times r}$ 和上三角矩阵 $\boldsymbol{R} \in \mathbb{C}^{r\times r}$，使得 $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{R}$，即 $\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{W}\boldsymbol{R}^{-1}$ 且 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{R} = \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}$，从而

$$\boldsymbol{P}_{V_1} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{R}^{-1})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}.$$

定理 4.3.5 （正交投影变换的矩阵 II） 在酉空间(或欧氏空间) V 中，沿 $V_1^{\perp}$ 到 r 维子空间 V_1 的正交投影变换 $\mathcal{P}$ 在 V 的任意一组基下的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 都可表示为

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} \tag{4.3.5}$$

其中，$\boldsymbol{W} \in \mathbb{C}^{n\times r}$ 是列满秩矩阵.

式 (4.3.5) 中的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 也满足 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}$，因此它也是正交投影矩阵. 这样我们就能从任意列满秩矩阵 $\boldsymbol{W}$ (注意 $\boldsymbol{W}$ 未必是方阵) 构造出正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}$. 至于更一般的投影矩阵的构造公式，请参阅文献[30]第 690 页.

例 4.3.1　已知 $\boldsymbol{\alpha}_1=(1,2,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(0,1,1)^{\mathrm{T}}$，$V_1=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$，求正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 及向量 $\boldsymbol{x}=(1,2,3)^{\mathrm{T}}$ 沿 $V_1^{\perp}$ 到 V_1 的投影.

解：因为 $\boldsymbol{W}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=\begin{pmatrix}1&0\\2&1\\0&1\end{pmatrix}$，所以 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}=\begin{pmatrix}5&2\\2&2\end{pmatrix}$，$(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}=\frac{1}{6}\begin{pmatrix}2&-2\\-2&5\end{pmatrix}$，

从而

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}=\frac{1}{6}\begin{pmatrix}2&2&-2\\2&5&1\\-2&1&5\end{pmatrix}$$

而且向量 $\boldsymbol{x}=(1,2,3)^{\mathrm{T}}$ 沿 $V_1^{\perp}$ 到 V_1 的投影为 $\boldsymbol{Px}=(0,5/2,5/2)^{\mathrm{T}}$.

有些读者可能已经注意到，在前几章里，我们从特殊的向量空间 $\mathbb{R}^n$ 逐步推广到一般的线性空间 V，从欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 逐步推广到欧氏空间 V，进而推广到酉空间 V. 在本章里，我们则采取了一种"逆向工程"，即从最一般的正规变换(正规矩阵)特殊到 Hermite 变换(Hermite 矩阵)及半正定变换(半正定矩阵)，再特殊到正交投影变换(正交投影矩阵). 这些变换(矩阵)之间的关系，可如图 4 - 11 所示. 至于前面的思考题，显然 Householder 矩阵作为正交矩阵，不可能是投影矩阵，更不可能是正交投影矩阵.

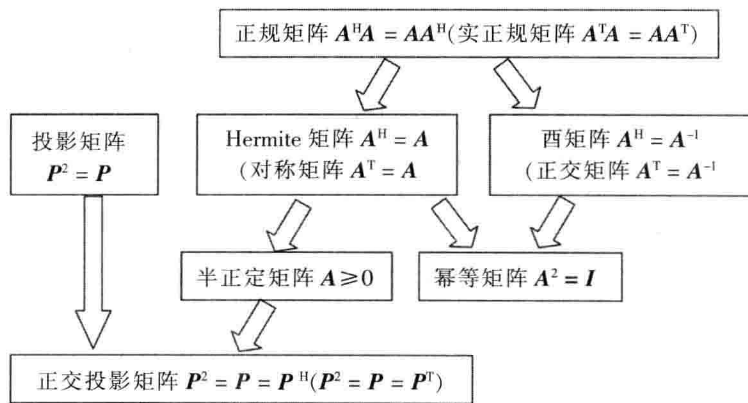


图 4 - 11　几种特殊矩阵(变换)之间的关系

4.4　谱分解的应用

只要我们具有了逆向思维和计算思维，就会发现谱分解的应用非常广泛. 比如正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，逆过来看，就意味着一旦给定 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{\Lambda}$，就能反过来重构出矩阵 $\boldsymbol{A}$，这就是所谓特征值反问题. 而从计算角度查看正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解表达式 (4.1.8)，则意味

着若令

$$\boldsymbol{A}_k = \lambda_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}} + \lambda_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + \lambda_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{u}_k^{\mathrm{H}}$$

则随着 k 的递增，$\boldsymbol{A}_k$ 似乎越来越“逼近”最终的 $\boldsymbol{A}$.

本节我们只介绍谱分解在信号处理中的两个应用：离散 Karhunen-Loeve 变换和主成分分析.

4.4.1 离散 Karhunen-Loeve 变换

我们先说明几个基本概念.

在信号处理中，由于噪声和干扰的大量存在，观测数据通常取随机变量 $x(\xi)$，即样本空间到实数集的映射. 其中的样本点 ξ 可以是时间 t、圆频率 f、角频率 ω 或位置 s 等. 含有 m 个随机变量的实值向量 $\boldsymbol{x}(\xi) = [x_1(\xi), x_2(\xi), \cdots, x_m(\xi)]^{\mathrm{T}}$ 称为 m 维随机向量，常简写为 $\boldsymbol{x}$. 若随机变量 $x_i(\xi)$ 的期望为 $E\{x_i(\xi)\} = \mu_i$，则称 $(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_m)^{\mathrm{T}}$ 为 x 的均值向量，记为 $E\{\boldsymbol{x}\}$.

称 m 阶方阵 $E\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\} = (r_{ij})$ 为随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵，并记为 $\boldsymbol{R}_x$. 其中 r_{ii} 是 $x_i(\xi)$ 的自相关函数，即 $r_{ii} = E\{|x_i^2|\}$ $(i = 1, 2, \cdots, m)$，r_{ij} 是 $x_i(\xi)$ 与 $x_j(\xi)$ 之间的互相关函数，即 $r_{ij} = E\{x_i x_j^{\mathrm{T}}\}$ $(i, j = 1, 2, \cdots, m$ 且 $i \neq j)$. 显然，$\boldsymbol{R}_x$ 是半正定对称矩阵，即 $\boldsymbol{R}_x \geqslant 0$.

称 $m \times n$ 阶矩阵 $E\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\} = (r_{x_i y_j})$ 为两个随机向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_m)^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}}$ 之间的互相关矩阵，记为 $\boldsymbol{R}_{xy}$，其中 $r_{x_i y_j} = E\{x_i y_j\}$ 是 x_i 与 y_j 之间的互相关函数. 如果 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的互相关矩阵为零矩阵，即 $\boldsymbol{R}_{xy} = \boldsymbol{O}$，则称随机向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 是正交的，记作 $\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y}$. 显然此时 $\boldsymbol{x}$ 的任一元素 x_i 与 $\boldsymbol{y}$ 的任一元素 y_j 都是正交的，即它们的互相关 $r_{x_i y_j} = E\{x_i y_j\} = 0$. 称 $E\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\}$ 为随机向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的内积，记为 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$. 特别地，称 $E\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\}$ 为随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数，记为 $\|\boldsymbol{x}\|^2$.

设 m 维随机向量 $\boldsymbol{x}$ 为某随机信号的观测样本，且均值向量 $E\{\boldsymbol{x}\} = \boldsymbol{0}$. 在信号处理中，通常将 $\boldsymbol{x}$ 展开成一组标准正交基 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_m$ 的线性组合，使得

$$\boldsymbol{x} = w_1 \boldsymbol{q}_1 + w_2 \boldsymbol{q}_2 + \cdots + w_m \boldsymbol{q}_m, \boldsymbol{q}_i \perp \boldsymbol{q}_j \quad (i \neq j) \tag{4.4.1}$$

记 $\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_m)$，$\boldsymbol{w} = (w_1, w_2, \cdots, w_m)^{\mathrm{T}}$，则上式即为 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{w}$，其中 $\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵. 这实际上就是对样本 $\boldsymbol{x}$ 做正交变换，从而用另外一组数 $\boldsymbol{w}$ 来表示样本 $\boldsymbol{x}$. 在这种新的表示下，显然信号 $\boldsymbol{x}$ 相对于基向量 $\boldsymbol{q}_i$ 的各分量 $w_i \boldsymbol{q}_i$ 不会互相干扰，从而就能凸显出 $\boldsymbol{x}$ 的某些性质.

为了减少变换后的系数 w_i 的个数，通常假定只取 $\boldsymbol{w}$ 的前 k 个系数 $w_1, w_2, \cdots, w_k$ 来逼近 $\boldsymbol{x}$，即

$$\hat{\boldsymbol{x}} = w_1 \boldsymbol{q}_1 + w_2 \boldsymbol{q}_2 + \cdots + w_k \boldsymbol{q}_k \quad (1 \leqslant k \leqslant m) \tag{4.4.2}$$

于是就产生了逼近误差 $\boldsymbol{e}_k$，即

$$\boldsymbol{e}_k = \boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}} = w_{k+1} \boldsymbol{q}_{k+1} + w_{k+2} \boldsymbol{q}_{k+2} + \cdots + w_m \boldsymbol{q}_m = \sum_{i=k+1}^{m} w_i \boldsymbol{q}_i$$

以及均方误差 E_k，即 $\boldsymbol{e}_k$ 的范数

$$E_k = \| e_k \|^2 = E\{e_k^{\mathrm{T}} e_k\} = \sum_{i=k+1}^{m} \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} E\{|w_i|^2\} \boldsymbol{q}_i = \sum_{i=k+1}^{m} E\{|w_i|^2\}$$

由于 $w_i = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}$，因此易知 $E\{|w_i|^2\} = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{R}_x \boldsymbol{q}_i$，这里 $\boldsymbol{R}_x$ 为随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵. 这样均方误差 E_k 就被改写为

$$E_k = \sum_{i=k+1}^{m} \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{R}_x \boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_i = 1 \quad (i = k+1, k+2, \cdots, m) \tag{4.4.3}$$

为使均方误差 E_k 最小化,构造拉格朗日代价函数

$$J = E_k + \sum_{i=k+1}^{m} \lambda_i (1 - \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_i) = \sum_{i=k+1}^{m} \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{R}_x \boldsymbol{q}_i + \sum_{i=k+1}^{m} \lambda_i (1 - \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{q}_i)$$

显然, J 取最小值时 $\dfrac{\partial J}{\partial \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{0}$, 利用第 7 章的相关知识,可知此即

$$\boldsymbol{R}_x \boldsymbol{q}_i = \lambda_i \boldsymbol{q}_i \quad (i = k+1, k+2, \cdots, m) \tag{4.4.4}$$

设随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 的谱分解为 $\boldsymbol{R}_x = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \boldsymbol{q}_i \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}$，并且按特征值从大到小排列,即 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_m \geqslant 0$. 要使均方误差 E_k 最小,式(4.4.2)中的逼近向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 中的正交向量组 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_k$ 必须选择为 $\boldsymbol{R}_x$ 的谱分解中的前 k 个特征向量,此时式(4.4.2)中系数向量 $\hat{\boldsymbol{w}} = (w_1, w_2, \cdots, w_k)^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{x}$, 其中 $\boldsymbol{Q}_1 = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_k)$ 为半正交矩阵,从而均方误差 E_k 为

$$E_k = \sum_{i=k+1}^{m} \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{R}_x \boldsymbol{q}_i = \sum_{i=k+1}^{m} \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}} \lambda_i \boldsymbol{q}_i = \sum_{i=k+1}^{m} \lambda_i^2$$

当 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_k \geqslant 0$ 是 $\boldsymbol{R}_x$ 的较大特征值且剩下的特征值都很小时,均方误差 E_k 就会很小,从而 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 就能非常好地逼近 $\boldsymbol{x}$. 这就是离散 Karhunen-Loeve 变换,也称 Hotelling 变换.

4.4.2　主成分分析

假设有 n 个统计相关的 m 维性质指标 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，我们希望通过某种变换,重新构造出 k 个 m 维的新特征指标 $y_1, y_2, \cdots, y_k$，它们在统计上互相独立,即这些新变量彼此正交,不再有信息冗余. 这一过程称为**特征抽取**(feature extraction). 显然,特征抽取的实质就是从空间 $\mathbb{R}^n$ 内,抽取出 k ($1 \leqslant k \leqslant n$)个彼此正交的新变量,张成空间 $\mathbb{R}^k$, 从而将存在冗余信息的高维空间 $\mathbb{R}^n$ 变换成无信息冗余的低维空间 $\mathbb{R}^k$, 这种变换称为**降维**(dimension reduction). **主成分分析**(principal component analysis, PCA)是一种最典型的降维变换,它要求按照所谓"**能量**"排序后,这 k 个新特征指标具有原始指标的大部分能量,即它们被视为原始指标的**主成分**或**主分量**.

定义 4.4.1　称随机向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 的范数 $\|\boldsymbol{x}\|^2 = E\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}\}$ 为 x 的**能量**(energy),记为 E_x. 特别地,当 $n = 1$ 时,称 $\|x\|^2 = E\{|x|^2\}$ 为随机变量 x 的能量,记为 E_x.

设随机向量 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$ 的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 的特征值为 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$,

且其前 k 个特征值为主特征值,即它们是 $\boldsymbol{R}_x$ 比较大的特征值. 则主元分析法的步骤如下:

第一步:降维

由原始变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 构造 k 个主分量

$$y_j=\sum_{i=1}^{k}a_{ij}x_i=\boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j \quad (j=1,2,\cdots,k) \tag{4.4.5}$$

其中,$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$,而 $\boldsymbol{\alpha}_j=(a_{1j},a_{2j},\cdots,a_{kj})^{\mathrm{T}}$ 是待定系数组成的向量.

第二步:正交化

使 k 个主分量 $y_1,y_2,\cdots,y_k$ 成为标准正交组,即$(y_i,y_j)=\delta_{ij}$,则必须有 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}_j=\delta_{ij}$,即 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_k)$ 是正交矩阵.

第三步:能量最大化

设随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵$\boldsymbol{R}_x$ 的谱分解为$\boldsymbol{R}_x=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\boldsymbol{q}_i\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}$,取 $\boldsymbol{\alpha}_j=\boldsymbol{q}_j$,则各主分量的能量为

$$\begin{aligned}E_{y_j}&=E\{|y_j|^2\}=E\{(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_j)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})\}=E\{\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_j\}=\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}E\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}\boldsymbol{q}_j=\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_j\\&=\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}(\lambda_1\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}+\lambda_2\boldsymbol{q}_2\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}+\cdots+\lambda_n\boldsymbol{q}_n\boldsymbol{q}_n^{\mathrm{T}})\boldsymbol{q}_j=\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}}(\lambda_j\boldsymbol{q}_j\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}})\boldsymbol{q}_j=\lambda_j \quad (j=1,2,\cdots,k)\end{aligned}$$

因此 $E_{y_1}\geqslant E_{y_2}\geqslant\cdots\geqslant E_{y_k}$,即主分量的能量逐渐降低. 由于

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\boldsymbol{R}_x)&=\{|x_1|^2\}+E\{|x_2|^2\}+\cdots+E\{|x_n|^2\}=E_{x_1}+E_{x_2}+\cdots+E_{x_n}\\&=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n\approx\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_k\end{aligned}$$

故 $E_{y_1}+E_{y_2}+\cdots+E_{y_k}=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_k\approx E_{x_1}+E_{x_2}+\cdots+E_{x_n}$,即 k 个相互正交的主分量的能量之和近似等于原来 n 个随机数据的能量之和,损失的能量 $\lambda_{k+1}+\lambda_{k+2}+\cdots+\lambda_n$ 非常小.

当观测数据来自 m 个信道时,设所得数据序列为 $\{x_i(j)\}$,$i=1,2,\cdots,m,j=1,2,\cdots,n$. 记观测数据矩阵 $\boldsymbol{X}=(x_{ij})=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$,其中 $x_{ij}=x_i(j)$. 设 $\boldsymbol{X}$ 的空间相关矩阵为 $\boldsymbol{R}=\frac{1}{n}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$,并设 $\boldsymbol{X}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$.

如果我们希望从观测数据中抽取表示共性的特征 $\varphi_i(j)$,使得观测数据被表示成

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi} \tag{4.4.6}$$

其中,$\boldsymbol{A}=(a_{ij})(i,j=1,2,\cdots,m)$,称为展开系数矩阵;$\boldsymbol{\Phi}=(\varphi_i(j))(i=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,n)$表示的则是 m 个信道信号特征的矩阵. 具体到元素,就是

$$x_i(j)=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}\varphi_k(j) \quad (i=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,n) \tag{4.4.7}$$

在式(4.4.6)中,需加上的正交归一化条件是$\frac{1}{n}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}=I$,从而 $R=\frac{1}{n}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$.

另外,由 $\boldsymbol{R}\geqslant 0$ 可知,$\boldsymbol{R}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$,因此

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2} \text{ 或 } a_{ik}=\sqrt{\lambda_k}u_{ik} \tag{4.4.8}$$

其中，λ_k 和 $\boldsymbol{u}_i=(u_{i1},u_{i2},\cdots,u_{im})^{\mathrm{T}}$ 分别是 $\boldsymbol{R}$ 的特征值和对应的特征向量. 用 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 左乘式 (4.4.6)，并注意到式 (4.4.8)，可知

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Phi}$$

此即 $\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$，写成列向量形式，就是

$$\begin{pmatrix}\varphi_1(j)\\ \varphi_2(j)\\ \vdots\\ \varphi_m(j)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1^{-1/2}&&&\\&\lambda_2^{-1/2}&&\\&&\ddots&\\&&&\lambda_m^{-1/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{u}_m^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1^{-1/2}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}x_j\\ \lambda_2^{-1/2}\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}x_j\\ \vdots\\ \lambda_m^{-1/2}\boldsymbol{u}_m^{\mathrm{T}}x_j\end{pmatrix}\quad(j=1,2,\cdots,n)$$

也就是

$$\varphi_i(j)=\lambda_i^{-1/2}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j\quad(i=1,2,\cdots,m)\tag{4.4.9}$$

这里 $\varphi_i(j)$ 相当于空间信号向量 $\boldsymbol{x}_j$ 本身与第 i 个特征向量 $\boldsymbol{u}_i$ 相关联的主要分量，即主分量.

利用正交归一化条件，可算得第 i 个信道观测信号的功率为

$$\begin{aligned}P_i&=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}x_i^2(j)=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\Big(\sum_{k=1}^{m}\sum_{l=1}^{n}a_{ik}a_{il}\varphi_s(j)\varphi_l(j)\Big)\\&=\sum_{k=1}^{m}\sum_{l=1}^{n}a_{ik}a_{il}\Big(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\varphi_k(j)\varphi_l(j)\Big)=\sum_{k=1}^{m}a_{ik}^2\end{aligned}\tag{4.4.10}$$

结合式 (4.4.7) 可知，式 (4.4.10) 反映了第 k 个特征子波 $\varphi_k(j)$ 对第 i 个信道的功率贡献. 另外结合式 (4.4.8) 和式 (4.4.10)，可知

$$P_i=\sum_{s=1}^{m}a_{ik}^2=\lambda_i\sum_{k=1}^{n}u_{ik}^2=\lambda_i$$

此即 $\boldsymbol{R}$ 的第 i 个特征值 λ_i，反映了第 i 个特征子波 $\varphi_i(j)$ 在功率中的贡献.

综上可知，从功率角度看，只有与比较大的特征值即主特征值 λ_i 相对应的特征子波 $\varphi_i(j)$ 的贡献比较大，因此选择这些特征子波，便能足够描绘出 m 个信道的空间信号. 也就是说，如果 R 只有 k 个主特征值，那么只要提取相应的 k 个主特征子波 $\varphi_1(j)$，$\varphi_2(j),\cdots,\varphi_k(j)$ 即可，此时观测信号的展开式为

$$x_i(j)=a_{i1}\varphi_1(j)+a_{i2}\varphi_2(j)+\cdots+a_{ik}\varphi_k(j)\quad(i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n)$$

4.5 矩阵的奇异值分解

从 1873 年被提出至今，奇异值分解（singular value decomposition ，SVD）已经成为矩阵计算中最有用和最有效的工具之一，并在最小二乘问题、最优化、统计分析、信号与图像处理、系统理论与控制等领域得到广泛应用.

4.5.1 从几何观测说起

如图 4-12 所示，圆 S 经过线性变换 $\mathcal{A}$ 的作用，变成了椭圆 $\mathcal{A}S$，即单位圆在线性变换 $\mathcal{A}$ 下的像是一个椭圆，圆的正交方向 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2$（一般取单位向量）分别变成了椭圆的长轴 $\sigma_1\boldsymbol{u}_1$ 和短轴 $\sigma_2\boldsymbol{u}_2$.

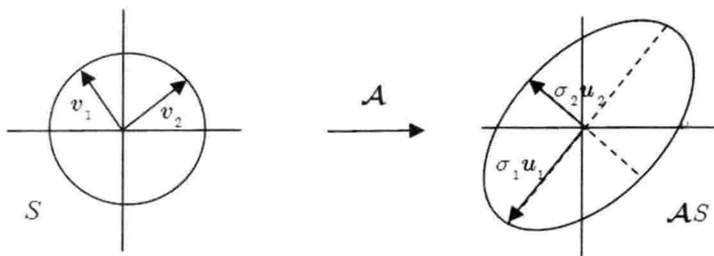


图 4-12　2×2 矩阵的 SVD

推广到 n 维后情况如何呢？设矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ $(m\geqslant n)$ 对应的线性映射为 $\mathcal{A}$. 一般地，$\mathbb{R}^n$ 中的单位球面

$$S=\{\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^n\mid\|\boldsymbol{x}\|\leqslant 1\}$$

经过线性映射 $\mathcal{A}$ 作用后变成 $\mathbb{R}^m$ 中的**超椭圆**(Hyperelliptic curve)$\mathcal{A}S$，即在某些正交方向 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m\in\mathbb{R}^m$ 上，以某些因子 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m$（可能为零）拉伸 $\mathbb{R}^m$ 中的单位球面后所得的曲面，向量 $\sigma_1\boldsymbol{u}_1,\sigma_2\boldsymbol{u}_2,\cdots,\sigma_m\boldsymbol{u}_m$ 称为超椭圆的**主半轴**(principal semiaxe)，长度依次为 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_m$，并且恰好有 r 个长度非零，这里 $r=r(A)$. 这就是说单位球面在任意线性映射 $\mathcal{A}$ 下的像是一个超椭圆.

假定矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ $(m\geqslant n)$ 是列满秩矩阵，则 $\mathbb{R}^n$ 中的 n 个正交方向 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n$ 变成了超椭圆的主半轴 $\sigma_1\boldsymbol{u}_1,\sigma_2\boldsymbol{u}_2,\cdots,\sigma_n\boldsymbol{u}_n$，我们称 $\mathcal{A}S$ 的 n 个主半轴的长度 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n$ $(\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_n>0$，习惯上按降序编号）为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**奇异值**(singular value)，单位向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**左奇异向量**(left singular vector)，它们张成的空间称为左奇异空间(left singular space)，左奇异向量的原像 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的**右奇异向量**(right singular vector)，它们张成的空间称为**右奇异空间**(right singular space). 显然，适当编号后应成立 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j=\sigma_j\boldsymbol{u}_j$ $(j=1,2,\cdots,n)$.

思考: 上述的左右奇异向量似乎与图中的左右相悖，何以要采取这样的定义呢？

前面已经指出 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j=\sigma_j\boldsymbol{u}_j$ $(j=1,2,\cdots,n)$，即

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n)$$

写成矩阵形式，即为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$，这里矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}$ 是半酉矩阵，$\boldsymbol{V}$ 是酉矩阵. 这样就得到 $\boldsymbol{A}$ 的**约化**(reduced)**奇异值分解**，如图 4-13 所示.

$$\boldsymbol{A}=\hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\tag{4.5.1}$$

观察式 (4.5.1)，现在你该明白左右奇异向量名称的来源了吧.

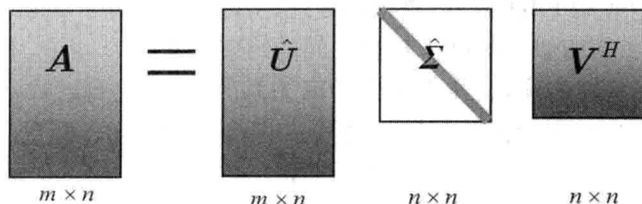


图 4-13　约化 SVD($m\geqslant n$)

同样地，将半酉矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}$ 扩充为 m 阶酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，并令 $\boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$，则得 $\boldsymbol{A}$ 的**完全**(full)**奇异值分解**，如图 4—14 所示.

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}} \tag{4.5.2}$$

也就是 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}=\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$.

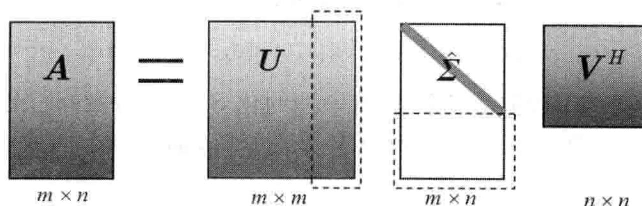


图 4-14　完全 SVD($m\geqslant n$)

至此，我们给出 SVD 的正式定义如下：

定义 4.5.1　对任意矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$（不要求 $m\geqslant n$，也不要求 $\boldsymbol{A}$ 满秩），称

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}} \tag{4.5.3}$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个(**完全**)**奇异值分解**，其中 $\boldsymbol{U}\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 是半酉矩阵，$\boldsymbol{V}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是酉矩阵，$\boldsymbol{\Sigma}\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 是"对角矩阵"($m\geqslant n$ 时上方是一个 n 阶对角阵，$m<n$ 时左侧是一个 m 阶对角阵)，而且 $\boldsymbol{\Sigma}$ 中的对角元 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_p$ 都非负且以非增的次序排列，即 $\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p\geqslant 0$, $p=\min(m,n)$.

从变换的角度来看式 (4.5.3)，可知 $\mathbb{R}^n$ 中的单位球面在任意线性映射 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$ 下的像一定是 $\mathbb{R}^m$ 中的一个超椭圆. 具体地说，酉变换 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 保持球面不变，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 将球面拉伸到一个有标准基的超椭圆，最后酉变换 $\boldsymbol{U}$ 旋转或镜射这个超椭圆，但不改变它的形状. 如果将完全奇异值分解用于线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解，则当 $\boldsymbol{A}$ 是可逆方阵时，显然可知 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{V}$ 也是可逆方阵，从而

$$\boldsymbol{b}\xrightarrow{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}=\bar{\boldsymbol{b}}\xrightarrow{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\boldsymbol{b}}=\tilde{\boldsymbol{x}}\xrightarrow{\boldsymbol{V}}\boldsymbol{V}\tilde{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x} \tag{4.5.4}$$

即原方程组的求解问题被分解成三个特殊的线性方程组的求解问题.

从矩阵等价的角度看，SVD 充分利用了两矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 的酉等价(unitary equivalence)，

即存在酉矩阵 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{Q}$ 使得 $\boldsymbol{PAQ}=\boldsymbol{B}$. 这样的处理,实际上是放宽了 Schur 分解中酉相似的要求,也就是去掉了酉相似中酉矩阵 $\boldsymbol{P}$、$\boldsymbol{Q}$ 之间的约束关系:$\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{Q}$,但仍然保留了酉性(正交性)优越于等价性的优点. 作为失去约束关系的弥补,它自然收获了比 Schur 分解中的上三角矩阵 $\boldsymbol{T}$ 更特殊的标准型 $\boldsymbol{\Sigma}$,也就是与第 1 章中的标准型 $\boldsymbol{N}_A$ 类似的标准型. 在保持酉性(正交性)约束下,这已是终极的标准型.

定理 4.5.1　对任意矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$,都存在一个完全奇异值分解 (4.5.3),并且奇异值 $\{\sigma_j\}$ 是唯一确定的,也就是任意矩阵都酉等价于对角阵.

此定理的证明在下一小节末尾给出.

SVD 与特征值分解有根本的区别. 第一是基的数目不同,SVD 用了两组不同的基(左奇异向量和右奇异向量),而特征值分解只用一组基(特征向量);第二是基的性质不一样,SVD 使用了正交基,而特征值分解所用的基未必正交;第三是适用的矩阵不一样,SVD 适用于所有矩阵(包括长方阵),而特征值分解只适用于特定的方阵(并非所有的方阵);第四是应用范围不同,SVD 趋于侧重包含矩阵自身及其逆的问题,而特征值则趋于侧重包含有迭代的问题(如矩阵的幂及矩阵指数函数).

Matlab 中提供了内置函数 svd,可用于求矩阵 A 的奇异值分解. 调用格式

```
[U,S,V]= svd(A),[U,S,V]= svd(A,0),[U,S,V]= svd(A,' econ'),
```

分别返回 $\boldsymbol{A}$ 的完全 SVD、约化 SVD 和另一种约化 SVD. 两种约化 SVD 的区别在于当 $m<n$ 时,前者返回的矩阵 $\boldsymbol{S}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 同维且 $\boldsymbol{V}$ 是酉矩阵,而后者返回的矩阵 $\boldsymbol{S}$ 是方阵且 $\boldsymbol{V}$ 是 $n\times m$ 阶半酉矩阵.

另外 Matlab 中也提供了内置函数 svds,可用于求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的"部分"奇异值分解. 例如调用格式

```
S= svds(A),S= svd(A,k),S= svd(A,k,sigma)
```

分别返回矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的前 6 个奇异值、前 k 个最大奇异值和最接近 sigma 的 k 个奇异值. 详见 Matlab 帮助文档.

4.5.2　由 SVD 导出的矩阵性质

SVD 深刻地揭示了矩阵的结构,能帮助我们很好地处理矩阵中的"黄金",即矩阵的秩.

定理 4.5.2　设 r 表示矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 的非零奇异值的数目 $(r\leqslant\min(m,n))$,则 $r=r(\boldsymbol{A})$.

证明: 由于式 (4.5.3) 中的矩阵 $\boldsymbol{U}$、$\boldsymbol{V}$ 都是满秩阵,因此 $r(\boldsymbol{A})=r(\boldsymbol{\Sigma})=r$.

定理 4.5.2 说明 SVD 可用于计算矩阵的秩. 事实上,Matlab 中计算矩阵秩的内置函数 rank,就是基于 SVD 实现的. 其实现代码大致如下:

```
s = svd(A); tol = max(size(A))* eps(max(s)); r = sum(s > tol);
```

显然其中涉及 tol 这个缺省阈值(threshold),这是因为在数值计算中非常小的非零奇异值会被视为 0,因此这样求出的秩被称为**数值秩**(numerical rank),以区别于理论秩. 要想得到更接近理论秩的结果,可采用 Matlab 提供的调用格式 `rank(A,tol)`,并指定更小的阈

值. 例如

```
H= hilb(20);              %使用内置函数 hilb 生成 20 阶的 Hilbert 矩阵
r= rank(H)                %计算 H 的秩,计算结果为 r=13,理论解为 r=20
r1= rank(H,eps^2)         %将阈限 tol 设置为 eps^2,计算结果为 r1=20
```

另外,定理 4.5.2 也深刻地解释了拥有零奇异值的方阵何以被称为是奇异的(即秩是亏损的),换句话说,零奇异值刻划了方阵的奇异性. 而对于长方阵,显然零奇异值也意味着矩阵不是满秩的(既不行满秩也不列满秩),即矩阵的秩也是亏损的.

用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左右奇异向量也可以非常方便地表示 $N(\boldsymbol{A})$ 和 $R(\boldsymbol{A})$.

定理 4.5.3　设 r 表示矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 的非零奇异值的数目 $(r \leqslant \min(m,n))$, 且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$, 其中 $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n)$, $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n)$, 则

$$R(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r), N(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n) \tag{4.5.5}$$

证明:将 $\boldsymbol{A}$ 的完全 SVD 分解分块为

$$\boldsymbol{A} = (\overset{r}{\boldsymbol{U}_1} \quad \overset{m-r}{\boldsymbol{U}_2}) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}} \end{pmatrix} \begin{matrix} r \\ n-r \end{matrix} = \boldsymbol{U}_1 \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$$

其中, $\boldsymbol{U}_1 = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r)$, $\boldsymbol{V}_1 = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_r)$, 于是有

$$R(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{y} = \boldsymbol{Ax}\} = \{\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Sigma V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})\} \subset R(\boldsymbol{U}_1)$$
$$R(\boldsymbol{U}_1) = \{\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{z}\} = \{\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{z})\} \subset R(\boldsymbol{A})$$

从而

$$\begin{aligned} R(\boldsymbol{A}) &= R(\boldsymbol{U}_1) = \mathrm{span}(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r) \\ N(\boldsymbol{A}) &= \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}\} = \{\boldsymbol{x} \mid (\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma})(\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}\} \\ &= \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\} = \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{V}_2\} \\ &= \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n) \end{aligned}$$

证毕.

既然矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值对应将球面拉伸为超椭圆时各主半轴的拉伸因子,而特征值也表示某种拉伸的倍数,那么两者间存在什么关系呢?

定理 4.5.4　任意矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 的非零奇异值 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$ 就是矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 或 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 的非零特征值的平方根.

证明:设 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$, 则

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}) = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma})\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{V}^{-1})^{-1}(\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma})\boldsymbol{V}^{-1}$$

即 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}$ 相似. 易知对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}$ 的 n 个特征值为 $\sigma_1^2, \cdots, \sigma_r^2, 0, \cdots, 0$ $(r \leqslant \min(m,n))$, 因此 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的非零特征值 $\sigma_1^2, \cdots, \sigma_r^2$ 的平方根就是 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$.

对于 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 的 m 个特征值,有类似的计算. 证毕.

特别地,对于某些特殊矩阵,除了符号上的差异外,奇异值"几乎"就是特征值.

定理 4.5.5　Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值就是它的特征值的绝对值.

证明: 设 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，这里 $\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，$\boldsymbol{\Lambda}$ 为实对角矩阵. 令 $|\boldsymbol{\Lambda}|=\operatorname{diag}(|\lambda_1|,\cdots,|\lambda_n|)$，$\operatorname{sign}(\boldsymbol{\Lambda})=\operatorname{diag}(\operatorname{sign}(\lambda_1),\cdots,\operatorname{sign}(\lambda_n))$，则

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}|\boldsymbol{\Lambda}|\operatorname{sign}(\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{4.5.6}$$

易证矩阵 $\operatorname{sign}(\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 是酉矩阵，所以式 (4.5.6) 就是，$\boldsymbol{A}$ 的一个 SVD. 显然 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值就是矩阵 $|\boldsymbol{\Lambda}|$ 的对角元，即 $\boldsymbol{A}$ 的特征值的绝对值. 证毕.

推论 4.5.1 实对称矩阵的奇异值就是它的对角元的绝对值.

熟悉多元统计分析的读者都知道，定理 4.5.4 中出现的矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{H}}$ 就是协方差矩阵(covariance matrix)，这说明 SVD 也可以在多元统计分析中大展拳脚，事实上也确实如此.

最后，我们给出定理 4.5.1 的证法如下. 注意不能使用前面的几个性质，以免循环论证.

证明:

由于 $(\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A})^{\mathrm{H}}=\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A}$，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{Ax})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{Ax})=\|\boldsymbol{Ax}\|^2\geqslant 0$，所以 $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A}\geqslant 0$. 又因为方程组 $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}=\mathbf{0}$ 与 $\boldsymbol{Ax}=\mathbf{0}$ 同解，所以 $r(\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A})=r(\mathbf{A})=r$，从而可设 $\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A}$ 的 Schur 分解为

$$\mathbf{V}^{\mathrm{H}}(\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A})\mathbf{V}=\operatorname{diag}(\sigma_1^2,\cdots,\sigma_n^2) \tag{4.5.7}$$

其中，$\mathbf{V}=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)$，$\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_r>0=\sigma_{r+1}=\sigma_{r+2}=\cdots=\sigma_n$.

令 $\boldsymbol{V}_1=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r)$，$\boldsymbol{V}_2=(\boldsymbol{v}_{r+1},\boldsymbol{v}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{v}_n)$，$\boldsymbol{\Sigma}=\operatorname{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r)$，则由式 (4.5.7) 可知

$$\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}(\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A})\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{\Sigma}^2,\quad \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}}(\mathbf{A}^{\mathrm{H}}\mathbf{A})\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{O}$$

这说明 $\boldsymbol{AV}_1$ 的列互相正交，同时 $\boldsymbol{AV}_2$ 的列都是零向量，即 $\boldsymbol{AV}_2=\boldsymbol{O}$.

令 $\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{AV}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$，则 $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{I}$. 将 $\boldsymbol{U}_1$ 扩充为 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)$，这里 $\boldsymbol{U}_2\in\mathbb{C}^{m\times(m-r)}$，使 $\boldsymbol{U}$ 成为 $\mathbb{C}^m$ 的一组标准正交基组成的矩阵，则

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)=\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}_1 & \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}_2\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}_1 & \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$$

从而得到 $\boldsymbol{A}$ 的完全奇异值分解

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{4.5.8}$$

同时也可得到 $\boldsymbol{A}$ 的约化奇异值分解 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{pmatrix}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$. 证毕.

注意式 (4.5.8) 中的 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$ 与式 (4.5.3) 中的 $\boldsymbol{\Sigma}$ 对应. 两者尽管符号不同，但表达的是同一种对角状矩阵，有时为表述方便，常用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 统一来代表这两种表示，即规定 $\boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$.

4.5.3　SVD 的算法

根据定理 4.5.1 及定理 4.5.4 的证明过程，即得计算 SVD 的如下算法：

第一步，形成 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并计算其特征值分解 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$，并做分块 $\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)$；

第二步，令 $\boldsymbol{\Sigma}$ 为 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的非负对角元的平方根，计算 $U_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$（因为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$）；

第三步，通过求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ 的解空间的标准正交基，得 $\boldsymbol{U}_2$，从而得 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)$.

例 4.5.1　求下列矩阵的完全 SVD 分解和约化 SVD：

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{pmatrix}$；(2) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\1&0\end{pmatrix}$；(3) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&0&1\\1&2&0\end{pmatrix}$.

解：(1) $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}2&1&0\\1&2&0\\0&0&0\end{pmatrix}$，矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值分别为 3，1，0，对应的单位特征向量分别为 $\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{1}{\sqrt{6}}(1,1,2)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,-1)^{\mathrm{T}}$，从而 $\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_3)$，$\boldsymbol{V}_1=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2)$，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sqrt{3},1)$. 计算得

$$\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{-1}{\sqrt{2}}\\0&0\end{pmatrix}$$

解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$，得基础解系 $\boldsymbol{\beta}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$，从而 $\boldsymbol{U}_2=\boldsymbol{\beta}_3$，$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)$，故所求完全 SVD 为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\Sigma}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{O}\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}\begin{pmatrix}\sqrt{3}&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

由于 $\boldsymbol{A}$ 是方阵，故 $\boldsymbol{A}$ 的约化 SVD 与完全 SVD 相同.

(2) $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&0\\0&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&0\\1&0&1\end{pmatrix}$，矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值分别为 2，1，对应的正交特征向量分别为 $\boldsymbol{\varepsilon}_1=(1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\varepsilon}_2=(0,1)^{\mathrm{T}}$，从而 $\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2)=\boldsymbol{V}_1$，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sqrt{2},1)$. 计算得

$$\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&0\end{pmatrix}$$

解 $AA^{\mathrm{T}}y=\mathbf{0}$，得其基础解系为 $\boldsymbol{\beta}_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,1)^{\mathrm{T}}$，从而 $U_2=\boldsymbol{\beta}_3$，$U=(U_1,U_2)$，因此所求完全 SVD 为 $A=U\begin{pmatrix}\sqrt{2}&0\\0&1\\\hline 0&0\end{pmatrix}V^T$，约化 SVD 为 $A=U_1\boldsymbol{\Sigma}V_1^{\ \mathrm{T}}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2}&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$.

(3) $A^{\mathrm{T}}A=\begin{pmatrix}5&2&2\\2&4&0\\2&0&1\end{pmatrix}$，其特征值分别为 7,3,0，对应的单位特征向量分别为 $\boldsymbol{\varepsilon}_1=\frac{1}{\sqrt{14}}(3,2,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\varepsilon}_2=\frac{1}{\sqrt{6}}(1,-2,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\varepsilon}_3=\frac{1}{\sqrt{21}}(2,-1,-4)^{\mathrm{T}}$，从而 $V=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2,\boldsymbol{\varepsilon}_3)$，$V_1=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\boldsymbol{\varepsilon}_2)$，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sqrt{7},\sqrt{3})$. 计算得 $U_1=AV_1\boldsymbol{\Sigma}^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{-1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$. 令 $U=U_1$，则所求完全 SVD 为 $A=U\begin{pmatrix}\sqrt{7}&0&0\\0&\sqrt{3}&0\end{pmatrix}V^{\mathrm{T}}$，约化 SVD 为 $A=U\boldsymbol{\Sigma}V_1^{\mathrm{T}}$.

说明:显然此时 A 的约化 SVD 仍然可表示为 $A=U_1\boldsymbol{\Sigma}_1V_1^{\ \mathrm{T}}$，其中 $\boldsymbol{\Sigma}_1=\mathrm{diag}(\sqrt{7},\sqrt{3})$.

例 4.5.2　(奇异值的敏感性)考察 Matlab 测试矩阵库中的 gallery(3)，即下列矩阵 A 的特征值分解与奇异值分解：

$$A=\begin{pmatrix}-149&-50&-154\\537&180&546\\-27&-9&-25\end{pmatrix}$$

计算可知矩阵 A 的特征值为 $\lambda_1=1,\lambda_2=2,\lambda_3=3$，并且每个特征向量都整数化处理(即乘以适当倍数使得元素都变成整数)后组成的矩阵为 $X=\begin{pmatrix}1&-4&7\\-3&9&-49\\0&1&9\end{pmatrix}$，显然仍有 $A=X\Lambda X^{-1}$，即

$$\begin{pmatrix}-149&-50&-154\\537&180&546\\-27&-9&-25\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&-4&7\\-3&9&-49\\0&1&9\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&&\\&2&\\&&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}130&43&133\\27&9&28\\-3&-1&-3\end{pmatrix}$$

计算可知 A 的奇异值为 $\sigma_1=817.7597,\sigma_2=2.4750,\sigma_3=0.0030$，注意到 gallery(3) 的三个特征值差别不大，但三个奇异值之间却存在如此巨大的差别. 这是因为在上述 SVD 算法中，问题被转化为特征值问题，但遗憾的是特征值问题对扰动可能有很高的灵敏性，尤其是当矩阵为非对称矩阵的时候，因此上面这个算法是不稳定的.

最后我们简单介绍一下 SVD 的数值算法的思想. 读者可与上述算法做对比分析.

数值计算中,求 Hermite 矩阵特征值的变换算法一般分两个阶段,即先把矩阵约化为三对角矩阵,再把三对角矩阵对角化. 因此计算 SVD 时,先把矩阵化为双对角形式(称为 Golub_Kahan 双对角化),然后再把双对角矩阵对角化(例如用 QR 算法). Matlab 中实际采用的是这种算法.

以 $m \geqslant n$ 时的 $m \times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为例. Golub-Kahan 双对角化的思想就是在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 两侧交替进行 Householder 变换,也就是寻找上双对角矩阵 B, 使得

$$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}, \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_1 & & \\ & \delta_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \gamma_{n-1} \\ & & & \delta_n \end{pmatrix} \tag{4.5.9}$$

一旦式 (4.5.9) 成立,则有 $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = (\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}, \boldsymbol{O})\begin{pmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$. 由于 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$ 是一个对称三对角矩阵,因此式 (4.4.9) 相当于把矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 三对角化. 接下来再计算 n 阶上双对角矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 SVD: $\boldsymbol{B} = \widetilde{\boldsymbol{U}}_2\boldsymbol{\Sigma}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2^{\mathrm{H}}$, 其中 $\widetilde{\boldsymbol{U}}_2, \widetilde{\boldsymbol{V}}_2$ 为 n 阶酉矩阵. 令 $\boldsymbol{U}_2 = \mathrm{diag}(\widetilde{\boldsymbol{U}}_2, \boldsymbol{I}_{n-m})$, $\boldsymbol{V}_2 = \widetilde{\boldsymbol{V}}_2$, 则

$$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{pmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{V}_2 = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}} & \\ & \boldsymbol{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{U}}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$$

从而得到 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\begin{pmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$$

其中 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2$ 和 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_2$ 都是酉矩阵.

4.5.4　SVD 教授



图 4－15　戈卢布 (1932—2007)

"Professor SVD",这是莫勒(Moler)2006 年撰写的一篇文章的题目,位于 MathWorks 公司专门提供给他的博客"Cleve's Corner"里. 该文是为了纪念矩阵计算领域拥有这一荣誉称号的巨擘戈卢布教授(Gene Howard Golub,见图 4－15),这个称号甚至成了他的个性车牌(见图 4－16).

戈卢布出生于大萧条期间的芝加哥,父母都是来自前苏联的犹太移民. 5 岁时,因为生活艰难,母亲去做了缝帽女工,这让他的幼儿园教育比别人更扎实. 到了 12 岁,他开始在亲戚家的药房里做送货员. 15 岁时父母离异,次年父亲撒手人寰. 药房经历使他立志要成为一名化学家,但家庭的贫困使得他只好选择了一所社区大学. 在那里

他修读了解析几何和分析，并尝到了其中的无穷乐趣，于是历史上又少了一名化学家（还记得施瓦茨吗）. 他考入芝加哥大学数学系，后决定去伊利诺斯大学完成他的学业. 这是个改变他一生的决定.



图 4-16　戈卢布的车牌

在伊利诺斯大学，他学到了矩阵论、多元统计分析、因子分析等知识，修读了一门计算机编程课程，并在计算机实验室担任助教. 要知道那时是 1953 年，计算机刚诞生不久！虽然他没修读过数值分析课程，但从所阅读的大量代码中他学到了很多. 拿到数理统计硕士学位后，他在导师陶伯（Abraham Haskel Taub，1911—1999，美国著名数学家和物理学家，主要贡献在于早期的广义相对论、微分几何和微分方程）的指导下研究切比雪夫多项式在线性方程组求解中的应用，从此开始终身从事数值分析的研究.

SVD 算法的诞生过程非常有趣. 1960 年前后，戈卢布在剑桥大学听过兰乔斯（Cornelius Lanczos，1893— 1974）关于 SVD 的讲座，留下深刻印象. 到了 1963 年，在斯坦福大学一次关于用投影法计算伪逆的讲座快结束时，主持人福赛思（George Forsythe，1917—1972，斯坦福大学计算机系的创办人）询问是否有人愿意来说说怎么计算矩阵的伪逆，这仿佛一道出发令，让他想到兰乔斯的讲座. 他开始让助手计算 $\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$ 的特征值，因为 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值就是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值的绝对值. 使用特征值计算程序，他们发现得到的三对角矩阵的对角元为零. 经过研究并结合自己以往的工作，戈卢布意识到可以通过重排矩阵以得到双对角矩阵. 经过一番苦思，戈卢布找到了双对角化的途径，即两侧都使用正交变换. 到了秋季，他在一次学术会议上遇到也在思考同一问题的卡亨，于是两人决定合作. 在福赛思的邀请下，卡亨访问了斯坦福大学，于是就诞生了那篇著名的论文.

多年后，有位学者来斯坦福大学做演讲. 演讲中间，他紧张地问听众："你们知道 SVD 吗？"答案马上就来了："你现在在 SVD 总部（headquarters）！"后来特雷弗腾（Lloyd Nick Trefethen，1955—，世界顶尖的数值分析学家）专门设计了一件文化衫，上面印着"SVD HQ".

我们必须谈谈《矩阵计算》这本扛鼎之作. 该书紧紧围绕矩阵计算中的三大核心问题（线性方程组求解、最小二乘问题和矩阵特征值问题），系统介绍了矩阵计算的基本理论和方法. 书中还给出了千余条参考文献. 如此丰富的营养自然滋养了一代代学子，因此它成了大家的"圣经". 在中国，早在 1989 年，袁亚湘院士就以之作为中科院的研究生教材.

戈卢布的贡献真是无远弗届，他的书籍和文章达到几百本（篇）之巨，涉及合作者几百余人. 而且他的文章含金量相当高，2007 年牛津大学出版社甚至以《矩阵计算中的那些里程碑》为题出版了他的著作选集.

悲伤的时刻早晚会来的，但对戈卢布而言却有些残忍了. 2007 年访问中国期间，他不幸染上流感，并使用了抗生素. 回国后，他感觉非常不好，特别是腿非常疼. 诊断结果居然是白血病！尽管医生说他至少还能活半年以上，可是他的健康却开始急剧恶化，三天后的早晨，一代巨擘驾鹤西游. 或许他是去另一个"平行宇宙"里，延续他对矩阵的热情，并继续为同事和后学提供饮食起居，和他们高谈阔论、交流学术、合撰文章和书籍……

亲爱的读者，请暂时低下你充满智慧的头颅，向这位伟大的学者致敬吧.

4.6 矩阵的标准型

4.6.1 实正规矩阵在正交相似下的标准型

我们知道，任意复方阵 $\boldsymbol{A}$ 可通过酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 酉相似于上三角阵 $\boldsymbol{T}$. 当 $\boldsymbol{A}$ 特殊为实矩阵时，我们自然希望 $\boldsymbol{U}$ 特殊为正交矩阵 $\boldsymbol{V}$，同时 $\boldsymbol{T}$ 也特殊成实上三角矩阵. 显然，这个要求难以满足，因为即使是实矩阵，也可能有复特征值. 看来在保证正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的同时，只能放宽对 $\boldsymbol{T}$ 的要求. 注意到复特征值 $\lambda = a \pm bi$ 是以共轭形式成对出现的，而 $\lambda = a \pm bi$ 是矩阵 $\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}$ 的特征值，因此合理的猜测是将 $\boldsymbol{T}$ 放宽为**准上三角矩阵**(quasi-upper triangle matrix，也称**拟上三角矩阵**)，即实矩阵 $\boldsymbol{T}$ 是对角线上具有 1×1 阶的实数和 2×2 阶的子矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的块上三角矩阵.

定理 4.6.1 **(实 Schur 标准型)** 若 $\boldsymbol{A}$ 是实方阵，则存在正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 使得

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{T}_A \tag{4.6.1}$$

其中，$\boldsymbol{T}_A$ 是准上三角矩阵，并且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值就是矩阵 $\boldsymbol{T}_A$ 的对角块的特征值，即每个 1×1 阶对角块对应一个特征值，每个 2×2 阶对角块对应于一对复共轭复特征值.

证明: 同 Schur 引理的证明一样，使用归纳法.

设 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值. 若 λ 是实的，则它对应一个实单位特征向量 $\boldsymbol{v}_1$，将 $\boldsymbol{v}_1$ 扩充为正交矩阵 $\boldsymbol{V}_1 = (\boldsymbol{v}_1, \widetilde{\boldsymbol{V}}_1)$，故 $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1$，$\widetilde{\boldsymbol{V}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1\widetilde{\boldsymbol{V}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{0}$，记 $\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{V}}_1 = \boldsymbol{\alpha}$，$\widetilde{\boldsymbol{V}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{V}}_1 = \boldsymbol{A}_1$，则

$$\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \widetilde{\boldsymbol{V}}_1^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{v}_1, \widetilde{\boldsymbol{V}}_1) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1 \end{pmatrix}$$

由归纳假设，存在 $n-1$ 阶正交矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{V}}_2$ 和准上三角矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{T}}$，使得 $\widetilde{\boldsymbol{V}}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 = \widetilde{\boldsymbol{T}}$. 令 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}_1\mathrm{diag}(1, \widetilde{\boldsymbol{V}}_2)$，易证 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，则

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{V}}_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\begin{pmatrix} 1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{V}}_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1 & \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \\ & \widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \boldsymbol{\alpha}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \\ \boldsymbol{0} & \widetilde{T} \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{T}_A$$

显然，$\boldsymbol{\alpha}\widetilde{\boldsymbol{V}}_2$ 是 $1\times(n-1)$ 阶矩阵，因此 $\boldsymbol{T}_A$ 是准上三角矩阵.

若 λ 是复的，则它对应一个复单位特征向量 ν_1，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1\boldsymbol{v}_1$，同时 $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{v}}_1 = \overline{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1} = \overline{\lambda_1\boldsymbol{v}_1} = \bar{\lambda}_1\bar{\boldsymbol{v}}_1$，即 $(\bar{\lambda}_1, \bar{\boldsymbol{v}}_1)$ 也是 $\boldsymbol{A}$ 的特征对. 取 $\boldsymbol{v}_1$ 的实部 $\boldsymbol{v}_R = \frac{1}{2}(\boldsymbol{v}_1 + \bar{\boldsymbol{v}}_1)$ 和虚部 $\boldsymbol{v}_I = \frac{1}{2i}(\boldsymbol{v}_1 - \bar{\boldsymbol{v}}_1)$，则 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_R, \boldsymbol{v}_I) = \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_1, \bar{\boldsymbol{v}}_1)$ 是一个 2 维不变子空间. 令 $\widetilde{\boldsymbol{V}}_1 = (\boldsymbol{v}_R, \boldsymbol{v}_I)$，其 QR 分解为 $\widetilde{\boldsymbol{V}}_1 = \boldsymbol{V}_1R$，则 $\mathrm{span}(\boldsymbol{V}_1) = \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_R, \boldsymbol{v}_I)$ 是不变的子空间，即存在 2 阶矩阵 $\boldsymbol{S}$，使得 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{S}$，也就是 $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{S}$. 扩充 $n\times2$ 阶矩阵 $\boldsymbol{V}_1$ 为正交矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{V}} = (\boldsymbol{V}_1, \boldsymbol{V}_2)$，则

$\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{S} = \boldsymbol{O}$. 记 $\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{A}_1$，故

$$\widetilde{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{V}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{V}_1, \boldsymbol{V}_2) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_1 \end{pmatrix}$$

同样，由归纳假设，存在 $n-2$ 阶正交矩阵 $\boldsymbol{V}_2'$ 和准上三角矩阵 $\boldsymbol{T}'$，使得 $\boldsymbol{V}_2'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{V}_2' = \boldsymbol{T}'$. 记 $\boldsymbol{V} = \widetilde{\boldsymbol{V}}\mathrm{diag}(\boldsymbol{I}_2, \boldsymbol{V}_2')$，易证 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_2 & \\ & \boldsymbol{V}_2'^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{V}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_2 & \\ & \boldsymbol{V}_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_2 & \\ & \boldsymbol{V}_2'^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_2 & \\ & \boldsymbol{V}_2' \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}_2' \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{T}' \end{pmatrix} \equiv \boldsymbol{T}_A\end{aligned}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}'$ 为 $2\times(n-2)$ 阶矩阵，因此 $\boldsymbol{T}_A$ 是准上三角矩阵. 证毕.

当实方阵 $\boldsymbol{A}$ 特殊为实正规矩阵时，根据正规矩阵的经验，我们自然猜测准上三角矩阵 $\boldsymbol{T}_A$ 也应该特殊为**准对角矩阵**(quasi-diagonal matrix，也称**拟对角矩阵**)，即对角线上具有 1×1 阶的实数和 2×2 阶的子矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的块对角矩阵.

定理 4.6.2　(实正规矩阵的正交相似标准型)若 n 阶实方阵 $\boldsymbol{A}$ 有 p 对复共轭特征值 $a_k \pm b_k i$ 和 m 个实特征值 λ_j ($k=1,2,\cdots,p; j=2p+1,2p+2,\cdots,2p+m$ 且 $2p+m=n$)，则 $\boldsymbol{A}$ 是实正规矩阵的充要条件是存在正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 使得

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{\Lambda}_A = \mathrm{diag}(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_2, \cdots, \boldsymbol{S}_p, \lambda_{2p+1}, \lambda_{2p+2}, \cdots, \lambda_n) \tag{4.6.2}$$

其中，$\boldsymbol{S}_k = \begin{pmatrix} a_k & -b_k \\ b_k & a_k \end{pmatrix}$.

我们称式 (4.6.2) 为**实正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正交相似标准型.**

在证明这个定理之前，我们先给出一个引理.

引理 4.6.1　设 $\boldsymbol{A}$ 是特征值为 $a\pm bi$ 的二阶实矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 是实正规矩阵的充要条件是存在二阶正交矩阵 $\boldsymbol{V}$，使得 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{S}$，其中 $\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}$.

证明: 充分性. 由于 $\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}$，故

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}) = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

必要性. 因为 $\boldsymbol{A}$ 是实正规矩阵，因此存在二阶酉矩阵 $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2)$，使得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \mathrm{diag}(a+bi, a-bi)$$

这里 $(a+bi, \boldsymbol{u}_1)$ 和 $(a-bi, \boldsymbol{u}_2)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，且 $\boldsymbol{u}_2 = \bar{\boldsymbol{u}}_1$.

令 $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2)$，其中 $\boldsymbol{v}_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2)$，$\boldsymbol{v}_2 = \dfrac{1}{i\sqrt{2}}(\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_2)$，显然 $\boldsymbol{V}$ 是实矩阵. 记 $\boldsymbol{P} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}$，则 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{P}$，因此 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵. 注意到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1+\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[(a+bi)\boldsymbol{u}_1+(a-bi)\boldsymbol{u}_2]\\ &= a\boldsymbol{v}_1-b\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2=b\boldsymbol{v}_1+a\boldsymbol{v}_2\end{aligned}$$

则 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2)=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2)\boldsymbol{S}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}$. 证毕.

定理 4.6.2 的证明:充分性是显然的.

必要性. $\boldsymbol{A}$ 是实正规矩阵,根据定理 4.6.1,存在正交矩阵 $\boldsymbol{V}_1$ 和准上三角实矩阵 $\boldsymbol{T}_A$,使得

$$\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{V}_1^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{T}_A=\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{T}_{22}\end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{T}_{22}$ 是对角元为 $\lambda_{2p+1},\lambda_{2p+2},\cdots,\lambda_{2p+m}$ 的上三角矩阵,$\boldsymbol{T}_{11}$ 是对角线上全为二阶矩阵的准上三角矩阵,即

$$\boldsymbol{T}_{11}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{S}_{11} & \boldsymbol{S}_{12} & \cdots & \boldsymbol{S}_{1p}\\ & \boldsymbol{S}_{22} & \cdots & \boldsymbol{S}_{2p}\\ & & \ddots & \vdots\\ & & & \boldsymbol{S}_{pp}\end{pmatrix} \tag{4.6.3}$$

这里的 $\boldsymbol{S}_{kk}$ 是特征值为 $a_k\pm b_k i\ (k=1,2,\cdots,p)$ 的二阶实矩阵.

因为 $\boldsymbol{A}$ 是实正规矩阵,易证 $\boldsymbol{T}$ 也是实正规矩阵,即 $\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}$,因此

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{T}_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{T}_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}$$

也就是

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{11}=\boldsymbol{T}_{11}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{12}=\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\\ &\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{11}=\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{12}+\boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{22}=\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{4.6.4}$$

由于 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{11})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{T}_{11}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}})$,故由式(4.6.4)中的第一式可知 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}})=0$. 对任意矩阵 B,直接计算可知 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的所有元素的平方和,因此 $\boldsymbol{T}_{12}=\boldsymbol{O}$,代入式(4.6.4)中,得 $\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{11}=\boldsymbol{T}_{11}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{22}=\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{T}_{22}^{\mathrm{T}}$,这说明 $\boldsymbol{T}_{11}$,$\boldsymbol{T}_{22}$ 均为实正规矩阵. 再根据引理 4.1.1,可知 $\boldsymbol{T}_{22}$ 是对角矩阵,即

$$\boldsymbol{T}_{22}=\mathrm{diag}(\lambda_{2p+1},\lambda_{2p+2},\cdots,\lambda_{2p+m})$$

由于 $\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{11}=\boldsymbol{T}_{11}\boldsymbol{T}_{11}^{\mathrm{T}}$,将式(4.6.3)代入,可得 p 个等式

$$\begin{cases}\boldsymbol{S}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{11}=\boldsymbol{S}_{11}\boldsymbol{S}_{11}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{S}_{12}\boldsymbol{S}_{12}^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{S}_{1p}\boldsymbol{S}_{1p}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{S}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{S}_{22}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{22}=\boldsymbol{S}_{22}\boldsymbol{S}_{22}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{S}_{23}\boldsymbol{S}_{23}^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{S}_{2p}\boldsymbol{S}_{2p}^{\mathrm{T}}\\ \cdots\cdots\\ \boldsymbol{S}_{1p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{1p}+\boldsymbol{S}_{2p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{2p}+\cdots+\boldsymbol{S}_{pp}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{pp}=\boldsymbol{S}_{pp}\boldsymbol{S}_{pp}^{\mathrm{T}}\end{cases} \tag{4.6.5}$$

同前面一样,对式(4.6.5)的第一式两边求矩阵的迹,并注意到 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{S}_{11}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{11}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{S}_{11}\boldsymbol{S}_{11}^{\mathrm{T}})$ 以及 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{S}_{1k}\boldsymbol{S}_{1k}^{\mathrm{T}})$ 是矩阵 $\boldsymbol{S}_{1k}$ 的所有元素的平方和,可得 $\boldsymbol{S}_{1k}=\boldsymbol{O}(k=2,3,\cdots,p)$. 将 $\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{O}$ 代入式(4.6.5)的第二式,并按照类似的证明手法,可知 $\boldsymbol{S}_{2k}=\boldsymbol{O}(k=3,4,\cdots,p)$. 继续这个过程,最终可得

$$\boldsymbol{S}_{ij}=\boldsymbol{O} \quad (i=1,2,\cdots,p;\ i<j\leqslant p)$$

因此式(4.6.3)中的 $\boldsymbol{T}_{11}$ 是拟对角矩阵,即 $\boldsymbol{T}_{11}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{S}_{11},\boldsymbol{S}_{22},\cdots,\boldsymbol{S}_{pp})$, 从而

$$\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{V}_1^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{T}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{S}_{11},\boldsymbol{S}_{22},\cdots,\boldsymbol{S}_{pp},\lambda_{2p+1},\lambda_{2p+2},\cdots,\lambda_{2p+m})$$

根据引理 4.6.1,对任意 $\boldsymbol{S}_{kk}$, 都存在二阶正交矩阵 $\boldsymbol{V}_{kk}^{\mathrm{T}}$, 使得 $\boldsymbol{V}_{kk}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_{kk}\boldsymbol{V}_{kk}=\boldsymbol{S}_k$ ($k=1,2,\cdots,p$). 令

$$\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}_1\mathrm{diag}(\boldsymbol{V}_{11},\boldsymbol{V}_{22},\cdots,\boldsymbol{V}_{pp},\boldsymbol{I}_k)$$

验算易知式(4.6.2)成立. 证毕.

对特殊的实正规矩阵,标准型更特殊,例如:

(1)正交矩阵 $\boldsymbol{A}$(在正交相似 $\boldsymbol{V}$ 下)的标准型为

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2,\cdots,\boldsymbol{S}_p,1,\cdots,1,-1,\cdots,-1)$$

其中, $\boldsymbol{S}_k=\begin{pmatrix}\cos\theta_k & \sin\theta_k\\ -\sin\theta_k & \cos\theta_k\end{pmatrix}$ 是二阶 Givens 矩阵 $\boldsymbol{G}(-\theta_k)$ ($k=1,2,\cdots,p$).

(2)实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的标准型是实对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$, 即 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{\Lambda}$.

(3)反对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的标准型为

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\mathrm{diag}(S_1,S_2,\cdots,S_p,1,\cdots,1,-1,\cdots,-1)$$

其中, $\boldsymbol{S}_k=\begin{pmatrix}0 & b_k\\ -b_k & 0\end{pmatrix}$, $\pm b_k i$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值($k=1,2,\cdots,p$).

在 Matlab 中,当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵时,调用格式

```
[U,T]= schur(A,'real')
```

及其缺省形式

```
[U,T]= schur(A)
```

返回的就是实 Schur 标准型.

4.6.2 各种矩阵标准型之间的关系

到目前为止,我们已学习了很多标准型,它们基本上可归结为**“对何种矩阵采用何种变换得到何种标准型”**. 一般来说,采用的变换越特殊,得到的标准型越一般,同时适用的矩阵也越特殊. 毕竟“鱼与熊掌不可兼得”. 以此为视角,可用图 4-17 来表示这些标准型之间的关系.

在图 4-17 中,有些标准型是以分解的名义给出的,例如 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{T}$ 实际上等价于 Schur 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{T}\boldsymbol{U}^{-1}$, 前者强调所用的变换及得到的结果,后者则强调其运算意义.

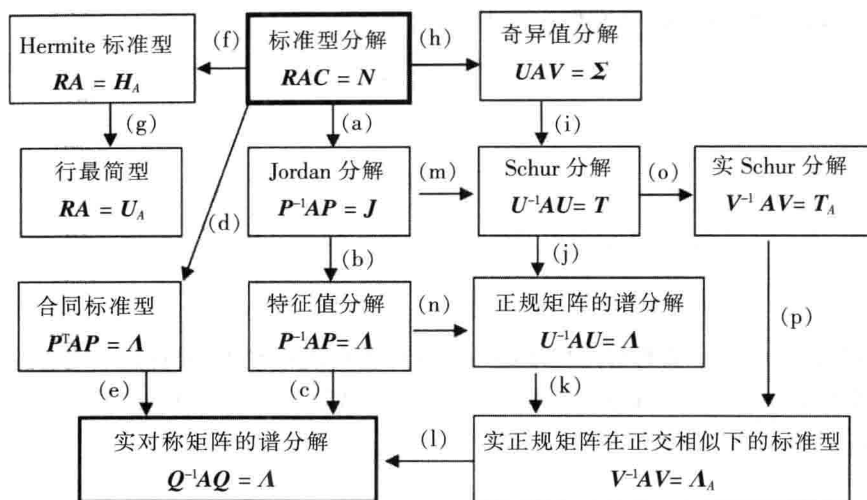


图 4-17　各种矩阵标准型的关系图

在图 4-17 中，(a) 意味着 A 特殊为方阵时，矩阵 R, C 特殊为 $C = P, R = C^{-1}$，同时作为平衡的代价，标准型 N 就被放宽为更一般的 Jordan 矩阵 J；(b) 意味着 J 特殊为对角阵 Λ（未必是实对角矩阵）时，适用矩阵必须特殊为可对角化矩阵 A；(c) 大家非常熟悉，可逆矩阵 P 特殊为正交矩阵 Q；(d) 是限定 $C = P, R = C^{T}$；(e) 要求 $P^{T} = P^{-1}$；(f) 意味着只采用行初等变换，即 $C = I$；(g) 意味着将行阶梯矩阵 H_A 化成了更特殊的行最简矩阵 U_A；(h) 将矩阵 R, C 特殊为酉矩阵 U, V，代价是标准型 N 一般化为 Σ；(i) 限定 A 为方阵且 U, V 互逆，代价是 Σ 变成了更一般的上三角矩阵 T；(j) 意味着 T 特殊为对角阵 Λ 时，适用矩阵必须特殊为正规矩阵 A；(k) 将酉矩阵 U 特殊为正交矩阵，同时 A 特殊为实正规矩阵，代价则是对角阵 Λ 变成了更一般的准对角矩阵 Λ_A；(l) 表示实正规矩阵 A 特殊为实对称矩阵时，准对角矩阵 Λ_A 特殊为实对角矩阵 Λ；(m) 则是可逆矩阵 P 特殊为酉矩阵 U，代价是 Jordan 矩阵 J 一般化为上三角矩阵 T；(n) 也是可逆矩阵 P 特殊为酉矩阵 U；(o) 表示 A 特殊为实矩阵，代价是上三角矩阵 T 变成了更一般的准上三角矩阵 T_A；(p) 则是实矩阵 A 特殊为实正规矩阵，因此准上三角矩阵 T_A 自然也特殊为准对角矩阵 Λ_A.

另外，出于美观，我们也略去了一些分解，比如 QR 分解 $A = QR$ 就等价于 $Q^{T}A = R$，这可以看成是从行最简型 $RA = U_A$ 衍生出来的，实在不行就从标准型分解 $RAC = N$ 这个源头出发，即限定 A 为方阵且 $R = Q^{T}, C = I$，代价是标准型 N 被放宽为更一般的单位上三角矩阵 R. 再比如 LU 分解 $A = LU$，也就是 $L^{-1}AU^{-1} = I$，即限定 $R = L^{-1}, C = U^{-1}$.

在图 4-17 中我们也不难发现，最常用的矩阵标准型无非是对角矩阵、Jordan 矩阵和上三角矩阵等. 不过我们千万不要被这个假象所迷惑，因为标准型作为零元素比较多的稀疏矩阵，其非零元素的位置及取值也千差万别. 她们或端庄凝重，或清新活泼，或温婉可人，或妖娆多态，共同构成了矩阵大花园姹紫嫣红的瑰丽景观. 这就是说，除了上面已介绍的这些之外，还有许许多多"翩若惊鸿，婉若游龙"的标准型，她们也"华容婀娜，令我忘餐". 比如三对角矩阵、Heisenberg 矩阵，以及矩阵 C 的特征多项式

$$\varphi(\lambda) = |\lambda I - C| = \lambda^{n} - p_{n-1}\lambda^{n-1} - \cdots - p_1\lambda - p_0 = 0$$

对应的**友矩阵**或 **Frobenius 标准型** $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_1$ 或 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_2$，其中

$$\boldsymbol{C}_1=\begin{pmatrix}0 & 1 & & & \\ & 0 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & 0 & 1\\ p_0 & p_1 & \cdots & p_{n-2} & p_{n-1}\end{pmatrix} \text{或} \begin{pmatrix}p_{n-1} & p_{n-2} & \cdots & p_1 & p_0\\ 1 & 0 & & & \\ & 1 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 0\end{pmatrix},\boldsymbol{C}_2=\begin{pmatrix}0 & & & & p_0\\ 1 & 0 & & & p_1\\ & 1 & \ddots & & \vdots\\ & & \ddots & 0 & p_{n-2}\\ & & & 1 & p_{n-1}\end{pmatrix}$$

在控制理论中，$\boldsymbol{C}_1$ 称为**可控标准型**，$\boldsymbol{C}_2$ 则称为**可观标准型**. 要提醒读者的是，面对这些“动无常则，进止难期”的标准型，请不要就此“夜耿耿而不寐”，因为标准型的美丽后面还会继续.

习 题 四

4.1 若 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 是正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(\bar{\lambda},\boldsymbol{x})$ 是正规矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征对.

4.2 证明定理 4.1.6.

4.3 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 均为 n 阶正规矩阵且 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，则对任意正整数 k,l，证明 $\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{B}^l$，$\boldsymbol{B}^k\boldsymbol{A}^l$ 均为正规矩阵.

4.4 设 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵，则对任意复数 z,w，$z\boldsymbol{A}+w\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 必为正规矩阵.

4.5 设 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵，则 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 也是正规矩阵.

4.6 设 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶正规矩阵，则存在 n 阶酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AU}$ 和 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}$ 都是对角矩阵，即 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 可以同时酉对角化.

4.7 设 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵且 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^2$，则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$.

4.8 设复方阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Cartesian 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}+i\boldsymbol{C}$，则 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵的充要条件是 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 可交换，即 $\boldsymbol{BC}=\boldsymbol{CB}$.

4.9 n 阶复矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵的充要条件是存在正规矩阵 $\boldsymbol{B}$，使得 $\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{A}$，其中 k 是任意正整数.

4.10 求正规矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0 & -1 & i\\ 1 & 0 & 0\\ i & 0 & 0\end{pmatrix}$ 的谱分解表达式.

4.11 证明 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的整数次幂 $\boldsymbol{A}^k$ 仍然是 Hermite 矩阵，其中整数 k 为负整数时假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆.

4.12 已知 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$，则对任意实数 a,b，矩阵 $\boldsymbol{C}=a\boldsymbol{A}+b\boldsymbol{B}$ 仍然是 Hermite 矩阵.

4.13 已知矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 是 Hermite 矩阵，则 $\boldsymbol{AB}$ 也是 Hermite 矩阵的充要条件是 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$.

4.14 设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 都是 Hermite 矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 相似的充要条件是它们的特征多项式相同.

4.15 证明 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵的充要条件是对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}$ 是实数.

4.16 设酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的特征值不等于 -1，则矩阵 $\boldsymbol{I}+\boldsymbol{U}$ 可逆，且 $\boldsymbol{H}=i(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{U})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{U})^{-1}$ 是 Hermite 矩阵. 反之，若 $\boldsymbol{H}$ 是 Hermite 矩阵，则矩阵 $\boldsymbol{I}-i\boldsymbol{H}$ 可逆，且 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{I}+i\boldsymbol{H})$

$(\boldsymbol{I}-\mathrm{i}\boldsymbol{H})^{-1}$ 是酉矩阵.

4.17 设 $\boldsymbol{A}$ 是反 Hermite 矩阵,则 $\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{A}$ 都可逆,且 $\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}$ 是特征值不为 -1 的酉矩阵.

4.18 设 $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵,且 $\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}$ 是非奇异的,则 $\boldsymbol{A}$ 可表示为 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{S})^{-1}$,其中 $\boldsymbol{S}$ 是反对称矩阵.

4.19 设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶实对称矩阵,且 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$,则存在正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和整数 r,使得

$$\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{I}_r,\boldsymbol{O})$$

4.20 设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶实对称矩阵,且 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{I}$,则存在正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和整数 r,使得

$$\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\operatorname{diag}(\boldsymbol{I}_r,-\boldsymbol{I}_{n-r})$$

4.21 设 $\boldsymbol{A}$ 是幂零矩阵(即存在正整数 k,使得 $\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{O}$)且 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵,则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$.

4.22 求 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&2i\\0&3&0\\-2i&0&1\end{pmatrix}$ 的谱分解.

4.23 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 是 $m\times n$ 阶列满秩矩阵,则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}>0$.

4.24 设 $\boldsymbol{A}>0$, $\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵,则 $\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BA}$ 的特征值全是实数.

4.25 设 $\boldsymbol{A}\geqslant 0$ 且 $\boldsymbol{A}$ 是酉矩阵,则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$.

4.26 设 $\boldsymbol{A}\geqslant 0$,证明: $|\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}|\geqslant 1$,并且等号成立的充要条件是 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$.

4.27 设 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵,则存在 $t>0$,使得 $\boldsymbol{A}+t\boldsymbol{I}>0$ 且 $\boldsymbol{A}-t\boldsymbol{I}<0$.

4.28 设 $\boldsymbol{A}>0$, $\boldsymbol{B}>0$ 且 $\boldsymbol{AB}$ 是 Hermite 矩阵,证明 $\boldsymbol{AB}>0$.

4.29 证明 Hilbert 矩阵 $\boldsymbol{H}>0$.

4.30 证明酉空间(欧氏空间) $\boldsymbol{V}$ 中满足 $\mathcal{P}^2=\mathcal{P}$ 的线性变换 $\mathcal{P}$ 为投影变换.

4.31 设 $\boldsymbol{P}$ 是投影矩阵,证明 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 也是投影矩阵,并从变换角度加以解释.

4.32 设 $\boldsymbol{P}$ 是投影矩阵,证明并从变换角度解释 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{P}=\boldsymbol{O}$.

4.33 设 $\boldsymbol{P}$ 是 n 阶投影矩阵,证明 $N(\boldsymbol{P})=R(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$, $N(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=R(\boldsymbol{P})$ 以及 $\mathbb{C}^n=R(\boldsymbol{P})\oplus N(\boldsymbol{P})$.

4.34 证明投影矩阵的特征值只取 1 和 0 两个数值,并举例说明反之未必成立.

4.35 设 $\boldsymbol{P}$ 是 n 阶正交投影矩阵,证明 $\mathbb{C}^n=R(\boldsymbol{P})\oplus N(\boldsymbol{P})$.

4.36 证明式 (4.1.8) 中的矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是正交投影矩阵. 据此,你对谱分解表达式是否有新的认识?

4.37 设 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{P}'$ 均为正交投影矩阵,则 $\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}'$ 为正交投影矩阵当且仅当 $\boldsymbol{PP}'=\boldsymbol{P}'\boldsymbol{P}=\boldsymbol{O}$.

4.38 设 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{P}'$ 均为正交投影矩阵,则 $\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}'$ 为正交投影矩阵当且仅当 $\boldsymbol{PP}'=\boldsymbol{P}'\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}'$.

4.39 设 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{P}'$ 均为正交投影矩阵,且 $\boldsymbol{PP}'=\boldsymbol{P}'\boldsymbol{P}$,则 $\boldsymbol{PP}'$ 也是正交投影矩阵.

4.40 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全 SVD 和约化 SVD,其中 $\boldsymbol{A}$ 为:

(1) $\begin{pmatrix}-1&0&1\\0&1&0\\1&0&-1\end{pmatrix}$; (2) $\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{pmatrix}$; (3) $\begin{pmatrix}1&2\\1&2\\1&2\end{pmatrix}$; (4) $\begin{pmatrix}2&0\\0&-i\\0&0\end{pmatrix}$; (5) $\begin{pmatrix}0&-1&1\\2&0&0\end{pmatrix}$.

4.41 证明可逆方阵的行列式的绝对值为其奇异值之积.

4.42 **(奇异值酉不变)**设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$且$\boldsymbol{U}$、$\boldsymbol{V}$分别是$m$,$n$阶酉矩阵,则称$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{UAV}$与$\boldsymbol{A}$**酉等价**. 证明$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{B}$的奇异值相同. 它们的奇异向量有何关系?

4.43 已知$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$,其中$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,证明$\boldsymbol{A}$的奇异值就是$\boldsymbol{B}$的特征值的绝对值.

4.44 **(极分解)**对任意n阶复矩阵$\boldsymbol{A}$,存在酉矩阵$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{B}\geqslant 0$,$\boldsymbol{C}\geqslant 0$,使得$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BU}=\boldsymbol{UC}$,且

$$\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}},\boldsymbol{C}^2=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$$

第5章 范数及其应用

范数的英文是norm,其形容词normal,在数学中被译成正规(矩阵)、正态(分布)、法(方程、向量)和标准(正交基).这些译法尽管语义上略有歧异,但显然都能让人联想到《尚书·洪范》,这里"洪"即"大","范"即"法".该书相传是箕子向周武王陈述的九种根本性的治国大法,对后人影响极大.在数学里,范数是向量到实数的一种映射(函数),对向量这个兼具大小与方向即数与形的数学对象,范数度量的是向量的大小,即向量数的一面,在数学中意义深远.以此观之,深谙个中三昧的先辈选择了"范数"这个译名,可谓贴切之极矣.

5.1 向量范数

5.1.1 从绝对值及模说起

我们从实数的绝对值、复数的模以及向量的长度说起.鉴于我们考虑的是线性空间,因此我们仍把目光聚焦于加法和数乘运算,以揭示反映它们本质的性质.

例 5.1.1 实数 $a \in \mathbb{R}$ 的绝对值指的是量数 $|a| = a\operatorname{sgn}(a)$,它具有下列三条性质:

(1) $|a| \geqslant 0$,当且仅当 $a = 0$ 时,等号成立;

(2)对任意的 $\lambda \in \mathbb{R}$,成立 $|\lambda a| = |\lambda|\,|a|$;

(3)对任意的 $a,b \in \mathbb{R}$,都有 $|a+b| \leqslant |a| + |b|$.

例 5.1.2 复数 $z = (a,b) = a\cdot 1 + b\cdot i \in \mathbb{C}$ 的长度或模指的是量 $|z| = \sqrt{a^2+b^2}$,它也具有下列三条性质:

(1) $|z| \geqslant 0$,当且仅当 $z = 0$ 时,等号成立;

(2)对任意的 $\lambda \in \mathbb{R}$,成立 $|\lambda z| = |\lambda|\,|z|$;

(3)对任意的 $z_1,z_2 \in \mathbb{C}$,都有 $|z_1+z_2| \leqslant |z_1| + |z_2|$.

对于实数和复数,由于定义了它们的绝对值或模,这样我们就可以用这个度量来表示它们的大小(几何上就是长度),进而可以考察两个实数或复数的距离.

例 5.1.3 n 维欧氏空间 $\mathbb{R}^n$ 中向量 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ 的长度或范数定义为

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$$

显然，向量 $\boldsymbol{x}$ 的长度 $\|\boldsymbol{x}\|$ 也具有下列三条性质：

(1) $\|\boldsymbol{x}\| \geqslant 0$，当且仅当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 时，等号成立；

(2) 对任意的 $\lambda \in \mathbb{R}$，成立 $\|\lambda \boldsymbol{x}\| = |\lambda| \|\boldsymbol{x}\|$；

(3) 对任意的 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$，都有 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$

利用公理化的方法，可以把上述概念推广到数域 $\mathbb{F}$($\mathbb{F}=\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{F}=\mathbb{C}$)上的任意线性空间.

定义 5.1.1 （范数的定义） 设 V 是数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间，对任意向量 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，按照某种对应规则，都有一个非负实数 $f(\boldsymbol{\alpha})$ 与之对应，并且对任意 $k \in \mathbb{F}$ 及任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$，$f(\boldsymbol{\alpha})$ 都满足下列三个性质：

(1) （**正定性**）$f(\boldsymbol{\alpha}) \geqslant 0$；当且仅当 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$ 时，$f(\boldsymbol{\alpha}) = 0$；

(2) （**正齐性**）$f(k\boldsymbol{\alpha}) = |k| f(\boldsymbol{\alpha})$；

(3) （**三角不等式**）$f(\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}) \leqslant f(\boldsymbol{\alpha}) + f(\boldsymbol{\beta})$，

则称 $f(\boldsymbol{\alpha})$ 是向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 的**范数**(norm)，并称定义了范数的线性空间 V 为**赋范线性空间**(normed linear space).

注意：范数 $f(\boldsymbol{\alpha})$ 本质上是 $V \mapsto \mathbb{R}$ 的映射，并且满足上述三个性质. 考虑到直观性，一般更喜欢用与绝对值符号 $|\cdot|$ 相似的记号 $\|\boldsymbol{\alpha}\|$ 来表示 $\boldsymbol{\alpha}$ 的范数，即 $f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{\alpha}\|$.

思考：范数是线性空间 V 上的线性泛函吗?

例 5.1.4 设 V 是 $\mathbb{F}$ 上的内积空间，则由 $\|\boldsymbol{\alpha}\| = \sqrt{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}$ 定义的 $\|\cdot\|$ 是 V 上的范数，称为**内积 $(\cdot,\cdot)$ 的导出范数**(induced norm). 这说明范数未必都可由内积导出. 例如后面介绍的 $\|\cdot\|_\infty$ 和 $\|\cdot\|_1$. 因此内积空间是特殊的赋范线性空间.

例 5.1.5 在赋范线性空间 V 中，定义任意两向量 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$ 之间的距离为

$$d(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}\| \tag{5.1.1}$$

并称此距离 $d(\cdot,\cdot)$ 为 V 由**范数 $\|\cdot\|$ 导出的距离**.

易证按式 (5.1.1) 定义了距离的 V 满足下面的三条性质：

(1) （**对称性**）对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$，都有 $d(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = d(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})$；

(2) （**非负性**）对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta} \in V$，都有 $d(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) \geqslant 0$；当且仅当 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta}$ 时等号成立；

(3) （**三角不等式**）对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma} \in V$，都有 $d(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\gamma}) \leqslant d(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) + d(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma})$.

5.1.2 常用的向量范数

下面我们把目光聚集到常用的向量范数，毕竟它们是应用中的主角.

例 5.1.6 对任意 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n$，由

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2} = \sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}} \tag{5.1.2}$$

定义的 $\|\boldsymbol{x}\|_2$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数，称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的 **2 范数**或 **l_2 范数**，也称为 **Euclid 范数**.

显然式 (5.1.2) 可形式地推广到任意正实数 p.

例 5.1.7　对任意 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，当 $p\geqslant 1$ 时，由

$$\|\boldsymbol{x}\|_p=(|x_1|^p+|x_2|^p+\cdots+|x_n|^p)^{\frac{1}{p}} \tag{5.1.3}$$

定义的 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数，称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的 p **范数**，也称为 l_p **范数**或 **Holder 范数**.

特别地，当 $p=1$ 时，由

$$\|\boldsymbol{x}\|_1=|x_1|+|x_2|+\cdots+|x_n| \tag{5.1.4}$$

定义的向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的 1 **范数**，也称 l_1 **范数**或**和范数**.



图 5－1　曼哈顿地图

$\|\boldsymbol{x}\|_1$ 更被风趣地称为 **Manhattan 范数**. 你只要看一眼纽约曼哈顿地区的地图（见图 5－1），就能对 $\|\boldsymbol{x}\|_1$ 有个直观的形象. 事实上，为了直观化抽象的数学，从而在数学中引入形象思维，从古至今的数学家们可真是没少费心思. 比如方程的根（root）就来源于花拉子米（al-Khwarizmi，约 783－约 850，阿拉伯数学家，最早把方程作为研究的对象，被誉为代数学之父），因为他把未知量形象地称为 dirhem、"东西"或"（植物的）根"，这使得代数当时被称为"求根术". 他还贡献了"算法"（algorithm）和"代数学"（algebra）这两个最基本的数学术语. 又比如"欧氏空间"这一名词就源于施密特在函数空间中引入的大量欧氏几何术语. 事实上，逻辑思维和形象思维是人类思维的双翼，不可偏颇. 数学教育界一直在大力提倡"**合情推理**"（又译"**似真推理**"），希望在数学中大力弘扬归纳、类比、一般化、特殊化、想象和直觉等方法，从而将"冰冷的美丽"变成"火热的思考".

遗憾的是，当 $0<p<1$ 时，由式（5.1.3）定义的映射不是 $\mathbb{C}^n$ 上的范数. 因为 $n=2$ 且 $p=1/2$ 时，若取 $\boldsymbol{x}=(1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y}=(0,1)^{\mathrm{T}}$，则 $\|\boldsymbol{x}\|_{1/2}=\|\boldsymbol{y}\|_{1/2}=1$，$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_{1/2}=4$，从而

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_{1/2}>\|\boldsymbol{x}\|_{1/2}+\|\boldsymbol{y}\|_{1/2}$$

在广义实数（即将"无穷"看成数）范围内，p 能否取到正无穷大呢？

对任意 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，可"形式地"定义 $\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\lim\limits_{p\to+\infty}\|\boldsymbol{x}\|_p$. 显然，$\|x\|_\infty$满足非负性和齐次性，并且对任意 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，有

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_\infty=\max_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i+y_i|\leqslant\max_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i|+\max_{1\leqslant i\leqslant n}|y_i|=\|\boldsymbol{x}\|_\infty+\|\boldsymbol{y}\|_\infty$$

因此，$\|\boldsymbol{x}\|_\infty$是向量范数，称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的**无穷范数**（infinite norm）或 **∞范数**，也称 l_∞ **范数**. 问题是，怎么计算无穷范数呢？

我们需要将底数 $|x_1|^p+|x_2|^p+\cdots+|x_n|^p$"合并"成一项，这自然让我们想到绝对值最大的分量. 令 $|x_j|=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|x_i|$，则有

$$|x_j|^p\leqslant|x_1|^p+|x_2|^p+\cdots+|x_n|^p\leqslant n|x_j|^p$$

从而

$$|x_j| \leqslant (|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}} \leqslant n^{\frac{1}{p}} |x_j|$$

注意到 $\lim\limits_{p\to+\infty} n^{\frac{1}{p}} = 1$，因此

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \lim_{p\to+\infty} \|\boldsymbol{x}\|_p = |x_j| = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |x_i| \tag{5.1.5}$$

下面我们给出 p 范数($p \geqslant 1$)的证明. 为此,我们需要先证明两个重要的不等式.

定理 5.1.1 （Holder 不等式） 设实数 $p > 1$，$q > 1$ 且 $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$，并设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n$，则

$$\sum_{i=1}^n x_i y_i \leqslant \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^n |y_i|^q\right)^{\frac{1}{q}} \tag{5.1.6}$$

显然 $p = q = \frac{1}{2}$ 时 Holder 不等式就退化为 Cauchy-Schwartz 不等式.

证明:先证明对任意非负实数 u, v，总有

$$uv \leqslant \frac{u^p}{p} + \frac{v^q}{q} \tag{5.1.7}$$

构造函数 $v = u^{p-1}$ 并考虑如图 5－2 所示的图形. 令

$$S_1 = \int_0^u u^{p-1} \mathrm{d}u = \frac{1}{p} u^p, S_2 = \int_0^v v^{\frac{1}{p-1}} \mathrm{d}u = \frac{1}{q} v^q$$

显然,由图 5.2 可知 $S_1 + S_2 \geqslant uv$，而且仅当 $v = u^{p-1}$ 时等号成立,因此式 (5.1.7) 得证.

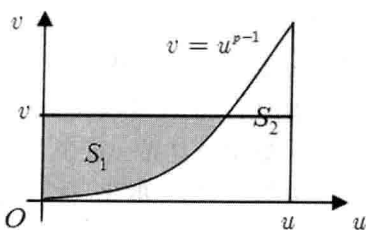


图 5－2

令 $u = \frac{|x_i|}{a}$，$v = \frac{|y_i|}{b}$，这里 $a = \left(\sum\limits_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$，$b = \left(\sum\limits_{i=1}^n |y_i|^q\right)^{\frac{1}{q}}$，代入式 (5.1.7) 并化简,得

$$x_i y_i \leqslant ab\left(\frac{1}{p} \cdot \frac{|x_i|^p}{a^p} + \frac{1}{q} \cdot \frac{|y_i|^q}{b^q}\right)$$

因此

$$\sum_{i=1}^n x_i y_i \leqslant ab\left(\frac{1}{pa^p} \sum_{i=1}^n |x_i|^p + \frac{1}{qb^q} \sum_{i=1}^n |y_i|^q\right) = ab\left(\frac{1}{p} + \frac{1}{q}\right)$$

$$= ab = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^n |y_i|^q\right)^{\frac{1}{q}}$$

证毕.

定理 5.1.2 （Minkowski 不等式） 设 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n$，则对任意实数 $p \geqslant 1$，有

$$\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{5.1.8}$$

证明: 当 $p=1$ 时,式 (5.1.8) 显然成立. 当 $p>1$ 时,令 $q=p/(p-1)$, 则

$$\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p = \sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i||x_i+y_i|^{p-1} = \sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i||x_i+y_i|^{\frac{p}{q}}$$
$$\leqslant \sum_{i=1}^{n}|x_i||x_i+y_i|^{\frac{p}{q}} + \sum_{i=1}^{n}|y_i||x_i+y_i|^{\frac{p}{q}}$$

由 Holder 不等式可知

$$\sum_{i=1}^{n}|x_i||x_i+y_i|^{\frac{q}{p}} \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{q}}$$
$$\sum_{i=1}^{n}|y_i||x_i+y_i|^{\frac{q}{p}} \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{q}}$$

因此

$$\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p \leqslant \left[\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}\right]\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{q}}$$

也就是

$$\left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

证毕.

现在我们可以轻松地证明 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ ($p\geqslant 1$)是范数了.

证明: $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 满足非负性和齐次性是显然的. 由 Minkowski 不等式,又有

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i+y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$
$$\leqslant \left(\sum_{i=1}^{n}|x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^{n}|y_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_p + \|\boldsymbol{y}\|_p$$

即三角不等式也成立. 因此 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 是向量范数. 证毕.

例 5.1.8　计算向量 $\boldsymbol{x}=(3,-4i,0,12)^{\mathrm{T}}$ 的 p 范数,这里 $p=1,2,\infty$.

解: $\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{k=1}^{4}|x_k| = |3|+|-4i|+|12| = 19$

$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(\sum_{k=1}^{4}|x_k|\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{|3|^2+|-4i|^2+|12|^2} = 13$

$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\limits_{1\leqslant k\leqslant 4}|x_k| = \max(3,4,12) = 12$

在 Matlab 中,提供了内置函数 norm,可用于计算向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数,其中 2 范数、1 范数、无穷范数和 p 范数的调用格式分别为

```
norm(x),norm(x,1),norm(x,'inf'),norm(x,p)
```

显然,缺省的是 2 范数.

上面这些向量范数在几何上如何理解呢?

对任意 $x=(x_1,x_2)\in\mathbb{C}^2$, 其 2 范数闭单位圆 $\|x\|_2\leqslant 1$ 即为 $x_1^2+x_2^2\leqslant 1$, 1 范数闭单位圆 $\|x\|_1\leqslant 1$ 即为 $|x_1|+|x_2|\leqslant 1$, ∞范数闭单位圆 $\|x\|_\infty\leqslant 1$ 即为 $|x_1|\leqslant 1$, $|x_2|\leqslant 1$. 加上一般的 p 范数,向量 x 的闭单位圆的图形如图 5-3 所示. 显然许多会议桌采用的就是最后一个图形.

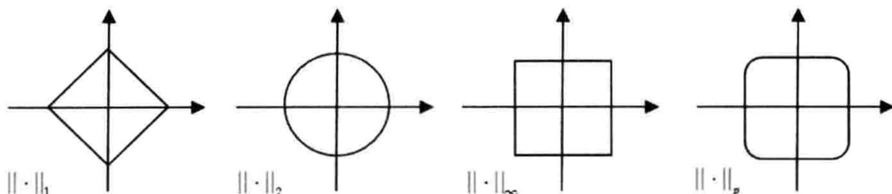


图 5-3 二维向量的几种范数的几何意义

例 5.1.9 **(椭圆范数)**若复矩阵 $A>0$, 则对任意 $x\in\mathbb{C}^n$, 由

$$\|x\|_A=\sqrt{x^HAx} \tag{5.1.9}$$

定义的 $\|\cdot\|_A$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数,称为向量 x 的**加权范数**(weighted norm)或**椭圆范数**(elliptic norm).

证明: 当 $x=\mathbf{0}$ 时, $\|x\|_A=\sqrt{\mathbf{0}^HA\mathbf{0}}=0$; 当 $x\neq\mathbf{0}$ 时,由 $A>0$ 可知 $x^HAx>0$, 即 $\|x\|_A>0$.

对任意 $k\in\mathbb{C}$, 有 $\|kx\|_A=\sqrt{(kx)^HA(kx)}=|k|\sqrt{x^HAx}=\|x\|_A$.

由于 $A>0$, 其特征值为正实数,故 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^H=U\Lambda^{1/2}\cdot\Lambda^{\frac{1}{2}}U^H=W^HW$, 其中 $W=\Lambda^{\frac{1}{2}}U^H$ 为可逆矩阵. 此时

$$\|x\|_A=\sqrt{x^HAx}=\sqrt{x^HW^HWx}=\sqrt{(Wx)^H(Wx)}=\|Wx\|_2$$

从而对任意 $y\in\mathbb{C}^n$, 有

$$\begin{aligned}\|x+y\|_A&=\|W(x+y)\|_2=\|Wx+Wy\|_2\\&\leqslant\|Wx\|_2+\|Wy\|_2=\|x\|_A+\|y\|_A\end{aligned}$$

因此式(5.1.9)定义的 $\|\cdot\|_A$ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数. 证毕.

因为 $\|x\|_A=\|Wx\|_2$, 从几何上看,这就是求可逆线性变换 W 的像 Wx 的长度. 如果 $W=\mathrm{diag}(w_1,w_2,\cdots,w_n)$, 此时所求即为

$$\|x\|_A=\|Wx\|_2=(|w_1x_1|^2+|w_2x_2|^2+\cdots+|w_nx_n|^2)^{\frac{1}{2}}$$

这就是何以这种范数被称为加权范数或椭圆范数. 另外,上面的推导说明只要运算 Wx 成立即可,因此对矩阵 W 的要求可放宽为列满秩矩阵.

在现代控制理论中,称二次型函数 $V(x)=\|x\|_P^2=x^HPx$ 为 Lyapunov 函数,这里 $P>0$. 众所周知,Lyapunov 函数是讨论线性和非线性系统稳定性的重要工具.

在上面这个例子中，我们用 2 范数定义了椭圆范数，这说明可以从已知范数构造出新的范数，而且因为正定 Hermite 矩阵是大量存在的，这就极大地扩展了范数的种类.

例 5.1.10　（**模式识别中的模式分类问题**）模式分类问题指的是根据已知类型属性的观测样本的模式向量 $\boldsymbol{s}_1$，$\boldsymbol{s}_2$，…，$\boldsymbol{s}_M$，判断未知类型属性的模式向量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$ 归属于哪一类模式. 其基本思想是根据 $\boldsymbol{x}$ 与模式样本向量 $\boldsymbol{s}_j$ $(j=1,2,\cdots,M)$ 的相似度大小作出判断.

最简单的方法是用两向量之间的距离来表示相似度，距离越小，相似度越大. 最典型的是欧氏（Euclidean）距离，即对任意 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$ 和 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，定义

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2=\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}=\left(\sum_{j=1}^{n}|x_j-y_j|^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

其他距离测度还包括：

(1)绝对值距离（Manhantan 距离）$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_1=\sum\limits_{j=1}^{n}|x_j-y_j|$；

(2)切氏（Chebyshev）距离 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_\infty=\max\limits_{j}|x_j-y_j|$；

(3)闵氏（Minkowski，闵科夫斯基，1864—1909，德国数学家，爱因斯坦的大学老师和密友，提出的闵氏时空为广义相对论的建立提供了框架）距离

$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_m=\left(\sum_{j=1}^{n}|x_j-y_j|^m\right)^{\frac{1}{m}}$$

(4)马氏（Mahalanobis，马哈拉诺比斯，1893—1972，印度统计学家）距离

$$d^2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_{S^{-1}}=\sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}$$

这里，$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 是从总体 $N(\mu,\boldsymbol{S})$ 中抽取的两个样本. 如果 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 来自两个数据集，则将 $\boldsymbol{S}$ 改为互协方差矩阵 $\boldsymbol{C}$.

对于函数空间 $\mathbb{C}[a,b]$，联想到其标准内积，并类比 p 范数，则有如下的范数：

例 5.1.11　对任意 $f(t)\in\mathbb{C}[a,b]$，由 $\|f(t)\|_p=\left(\int_a^b|f(t)|^p\mathrm{d}t\right)^{\frac{1}{p}}$（这里 $p\geqslant1$）定义的 $\|\cdot\|_p$ 是 $\mathbb{C}[a,b]$ 上的范数，称为函数 $f(t)$ 的 **L_p 范数**.

特别地，$p=1,2,\infty$时的 L_1 范数、L_2 范数和 L_∞ 范数分别为

$$\|f(t)\|_1=\int_a^b|f(t)|\,\mathrm{d}t$$

$$\|f(t)\|_2=\left(\int_a^b|f(t)|^2\mathrm{d}t\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\|f(t)\|_\infty=\max_{t\in[a,b]}|f(t)|$$

更一般地，借助于基和坐标向量，可将任意线性空间 V 中的范数转化为 F^n 上的向量范数.

定理 5.1.3　设 V 是数域 $\mathbb{F}$上的线性空间，$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 为 V 的一组基，任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V$

在这组基下的坐标向量为 $x \in \mathbb{F}^n$，则

$$\|\boldsymbol{\alpha}\|_V = \|\boldsymbol{x}\| \tag{5.1.10}$$

是 V 上的向量范数,其中 $\|\boldsymbol{x}\|$ 为 F^n 上的向量范数.

证明:对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$，若 $\boldsymbol{\alpha} \neq \boldsymbol{\theta}$，则 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，从而 $\|\boldsymbol{\alpha}\|_V = \|\boldsymbol{x}\| > 0$；若 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$，则 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，从而 $\|\boldsymbol{\alpha}\|_V = \|\boldsymbol{x}\| > 0$.

对任意 $k \in \mathbb{F}$，$k\boldsymbol{\alpha} \in V$ 的坐标向量为 $k\boldsymbol{x}$，故

$$\|k\boldsymbol{\alpha}\|_V = \|k\boldsymbol{x}\| = |k| \cdot \|\boldsymbol{x}\| = |k| \cdot \|\boldsymbol{\alpha}\|_V$$

设任意 $\boldsymbol{\beta} \in V$ 在基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标向量为 $\boldsymbol{y} \in F^n$，则 $\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}$ 的坐标向量为 $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$，从而

$$\|\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\beta}\|_V = \|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\| = \|\boldsymbol{\alpha}\|_V + \|\boldsymbol{\beta}\|_V$$

因此 $\|\boldsymbol{\alpha}\|_V$ 是 V 上的向量范数. 证毕.

在不致混淆时，$\|\boldsymbol{\alpha}\|_V$ 常略写为 $\|\boldsymbol{\alpha}\|$.

5.1.3 向量范数的几个性质

椭圆范数中,如果 $\boldsymbol{W}$ 取特殊的酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，显然此时 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$，从而 $\|\boldsymbol{x}\|_2 = \|\boldsymbol{x}\|_A = \|\boldsymbol{Ux}\|_2$.

定理 5.1.4 (Euclid 范数的酉不变性)对任意酉矩阵 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 以及任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$，有

$$\|\boldsymbol{Ux}\|_2 = \|\boldsymbol{x}\|_2 \tag{5.1.11}$$

证明: $\|\boldsymbol{Ux}\|_2^2 = (\boldsymbol{Ux}, \boldsymbol{Ux}) = (\boldsymbol{Ux})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{Ux}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|_2$. 证毕.

从变换角度看,这个结论是显然的,因为酉变换保持向量的内积不变,自然也保持了 Euclid 意义下的几何结构(长度、角度或范数等)不变.

在图 5-3 中,尽管几种范数对应的图形有差异,但它们都是封闭图形,都可以用一个圆心在原点的圆(2 范数意义下)来覆盖. 这说明尽管各种范数大小不同,但作为度量用的不同“尺子”,它们对外表现出明显的一致性,正所谓“内斗外和”. 这种性质就是范数的等价性.

定理 5.1.5 (向量范数的等价性)有限维线性空间 V 上的不同范数是等价的,即对 n 维线性空间 V 中任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 及 V 上的任意向量范数 $f = f(\boldsymbol{\alpha})$ 和 $g = g(\boldsymbol{\alpha})$，必存在正数 c_1, c_2，使得

$$c_1 g(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant f(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant c_2 g(\boldsymbol{\alpha}) \tag{5.1.12}$$

证明:先证明等价性是可传递的. 设 $\varphi(\boldsymbol{\alpha})$ 也为 V 上的向量范数,并且存在正数 c_1', c_2' 及 c_1'', c_2''，使得 $c_1'\varphi(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant f(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant c_2'\varphi(\boldsymbol{\alpha})$，$c_1''g(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant \varphi(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant c_2''g(\boldsymbol{\alpha})$，则 $c_1'c_1''g(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant f(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant c_2'c_2''g(\boldsymbol{\alpha})$. 因此问题转化为对特殊的向量范数 $g(\boldsymbol{\alpha})$，证明式 (5.1.11) 成立即可. 我们自然想到了 2 范数.

设任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 在 V 的一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标向量为 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{F}^n$，则由定理 5.1.3 可知

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{\alpha}\| = \|\boldsymbol{x}\|$$

对于特殊的 $g(\boldsymbol{\alpha})$，则有 $g(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{x}\|_2$.

下证 $f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{x}\|$ 是连续函数. 设任意 $\boldsymbol{\beta} \in V$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标向量为 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{F}^n$，则 $f(\boldsymbol{\beta}) = \|\boldsymbol{y}\|$，注意到 $\|\boldsymbol{x}\|_\infty \leqslant \|\boldsymbol{x}\| \leqslant n\|\boldsymbol{x}\|_\infty$，从而

$$|f(\boldsymbol{\alpha}) - f(\boldsymbol{\beta})| = |\|\boldsymbol{x}\| - \|\boldsymbol{y}\|| \leqslant \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| \leqslant n\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_\infty$$

因此，当 $\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_\infty < \delta$ 即 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ 非常接近时，有 $|f(\boldsymbol{\alpha}) - f(\boldsymbol{\beta})| \leqslant n\delta$，即 $f(\boldsymbol{\alpha}), f(\boldsymbol{\beta})$ 也非常接近，这就是说 $f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{x}\|$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的连续函数.

根据连续函数的性质，在有界闭集 $S = \{\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}^n \mid \|\boldsymbol{x}\|_2 = 1\}$ 即单位球上，函数 $f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{x}\|$ 可取到最大值 M 和最小值 m，而且 $m > 0$（否则 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，与 $\boldsymbol{x} \in S$ 矛盾）.

令 $d = \|\boldsymbol{x}\|_2$，$\boldsymbol{z} = \dfrac{\boldsymbol{x}}{d}$，则 $\|\boldsymbol{z}\|_2 = \dfrac{1}{d}\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$，即 $\boldsymbol{z} \in S$，因此 $f(\boldsymbol{\gamma}) = \|\boldsymbol{z}\|$ 满足

$$0 < m \leqslant f(\boldsymbol{\gamma}) = \|\boldsymbol{z}\| \leqslant M$$

这里，$\boldsymbol{z}$ 是 $\boldsymbol{\gamma}$ 在 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标向量. 又由于 $\boldsymbol{x} = d\boldsymbol{z}$，从而

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{x}\| = \|d\boldsymbol{z}\| = d\|\boldsymbol{z}\| = df(\boldsymbol{\gamma}) = f(\boldsymbol{\gamma})g(\boldsymbol{\alpha})$$

这样，就有 $mg(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant f(\boldsymbol{\alpha}) \leqslant Mg(\boldsymbol{\alpha})$，即 $f(\boldsymbol{\alpha})$ 与 $g(\boldsymbol{\alpha})$ 等价. 证毕.

注意这个结论对无限维未必成立. 另外，根据等价性，处理向量问题（例如下一章的向量序列敛散性问题）时，我们可以基于一种范数来建立理论，而使用另一种范数来进行计算.

5.2 矩阵范数

5.2.1 矩阵范数的概念

向量是特殊的矩阵，同时一个 $m \times n$ 阶的矩阵也可以看成一个 mn 维向量，因此我们自然想到将向量范数推广到矩阵范数.

定义 5.2.1 （**矩阵范数**）对 $F^{m\times n}$ 中的任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，如果按照某种对应法则，都有一个非负实数 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 与之对应，并且 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 还满足下列三条性质：

(1)（**正定性**）$\varphi(\boldsymbol{A}) \geqslant 0$，当且仅当 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$ 时，$\varphi(\boldsymbol{A}) = 0$；

(2)（**正齐性**）对任意 $\lambda \in \mathbb{F}$，成立 $\varphi(\lambda\boldsymbol{A}) = |\lambda|\varphi(\boldsymbol{A})$；

(3)（**三角不等式**）对任意 $A, B \in \mathbb{F}^{m\times n}$，都有 $\varphi(A + B) \leqslant \varphi(A) + \varphi(B)$，

则称 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的（**广义**）**矩阵范数**（matrix norm），记为 $\|\boldsymbol{A}\|_\varphi$ 或 $\|\boldsymbol{A}\|$.

显然这里的映射 φ 将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 映射为实数 $\varphi(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|$，即 $\varphi: \boldsymbol{A} \mapsto \varphi(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|$.

比照向量范数，我们自然可猜想到相应的矩阵范数的形式.

例 5.2.1 对任意 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，由

$$\varphi(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| \tag{5.2.1}$$

定义的 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的矩阵范数，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 m_1 **范数**，记为 $\|\boldsymbol{A}\|_{m_1}$.

证明: 正定性和齐次性是显然的. 下证三角不等式. 设任意 $\boldsymbol{B}=(b_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，则

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})&=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}+b_{ij}|\leqslant\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}(|a_{ij}|+|b_{ij}|)\\&=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|+\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|b_{ij}|=\varphi(\boldsymbol{A})+\varphi(\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

因此 $\|\boldsymbol{A}\|_{m_1}$ 是矩阵范数.

例 5.2.2 对任意 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，由

$$\varphi(\boldsymbol{A})=\max_{1\leqslant i\leqslant m,1\leqslant j\leqslant n}|a_{ij}| \tag{5.2.2}$$

定义的 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的矩阵范数，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 m_∞ **范数**，记为 $\|\boldsymbol{A}\|_{m_\infty}$.

证明: 留作练习.

例 5.2.3 对任意 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，类比式 (5.1.2)，我们定义

$$\varphi(\boldsymbol{A})=\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{\frac{1}{2}}=(\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}))^{\frac{1}{2}} \tag{5.2.3}$$

则 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的矩阵范数，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 m_2 **范数**或 **Frobenius 范数**(简称 **F 范数**)，也称为 **Schur 范数**或 **Hibert-Schmidt 范数**，记为 $\|\boldsymbol{A}\|_{m_2}$ 或 $\|\boldsymbol{A}\|_F$.

由于 $\|\boldsymbol{A}\|_F^2=\sum_{j=1}^{n}\|\boldsymbol{\alpha}_j\|_2^2$，这里 $\boldsymbol{\alpha}_j$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 j 列($j=1,2,\cdots,n$)，因此 F 范数也被称为 **Euclid 范数**. 特别地，当 $n=1$ 时矩阵 $\boldsymbol{A}$ 退化为列向量 $\boldsymbol{x}$，此时 $\|\boldsymbol{x}\|_F=\|\boldsymbol{x}\|_2$.

证明: 正定性和齐次性是显然的. 三角不等式即为 $p=2$ 时的 Minkowski 不等式. 证毕.

显然，当 $n=1$ 时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 m_1 范数、m_∞ 范数和 m_2 范数分别退化成了向量的 1 范数、∞范数和 2 范数.

在 Matlab 中，内置函数 norm 也可用于计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 F 范数，调用格式为

```
norm(A,'fro')
```

至于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 m_1 范数和 m_∞ 范数，也可通过简单的编程来解决.

5.2.2 算子范数及范数的相容性

矩阵不仅仅是向量的推广，它还可以看成变换或算子. 事实上，从算子或变换的角度来定义范数能让我们更深刻地理解矩阵范数.

定义 5.2.2 (**算子范数**)对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{m\times n}$，非负实数 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 表示变换 $\boldsymbol{A}$ 可以“拉伸”任意向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{F}^n$ 的最大倍数，也就是使不等式

$$u(\boldsymbol{Ax}) \leq cv(\boldsymbol{x}) \tag{5.2.4}$$

成立的最小的数 c. 我们称 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 为向量范数 $u(\boldsymbol{x})$ 和向量范数 $v(\boldsymbol{x})$ **诱导出的矩阵范数**，简称为**诱导范数**(induced norm)，也称为**算子范数**(operator norm)，记为 $\|\boldsymbol{A}\|_{u,v}$ 或简记为 $\|\boldsymbol{A}\|$. 特别地，当 $u(\boldsymbol{x})$ 与 $v(\boldsymbol{x})$ 相同时，称算子范数 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 为向量范数 $u(\boldsymbol{x})$ 诱导出的矩阵范数，记为 $\|\boldsymbol{A}\|_u$ 或简记为 $\|\boldsymbol{A}\|$.

由矩阵范数的正齐性可知 $\boldsymbol{A}$ 的作用是由它对单位向量的作用所决定的，因此可以等价地用单位向量在 $\boldsymbol{A}$ 下的像来定义矩阵范数，即

$$\varphi(\boldsymbol{A}) = \max_{0\neq x}\frac{u(\boldsymbol{Ax})}{v(\boldsymbol{x})} = \max_{v(\boldsymbol{x})=1} u(\boldsymbol{Ax})$$

若用 $\|\boldsymbol{x}\|_u$ 表示向量范数 $u(\boldsymbol{x})$，$\|\boldsymbol{x}\|_v$ 表示向量范数 $v(\boldsymbol{x})$，则上式也就是

$$\|\boldsymbol{A}\| = \max_{0\neq x}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_u}{\|\boldsymbol{x}\|_v} \tag{5.2.5}$$

特别地，对算子范数 $\|\boldsymbol{A}\|_u$，令 $d = \|\boldsymbol{x}\|_u$，$\boldsymbol{y} = \dfrac{\boldsymbol{x}}{d}$，则 $\|\boldsymbol{y}\|_u = \dfrac{1}{d}\|\boldsymbol{x}\|_u = 1$，从而

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}\| &= \max_{0\neq x}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_u}{\|\boldsymbol{x}\|_u} = \max_{0\neq x}\left\|\boldsymbol{A}\frac{\boldsymbol{x}}{d}\right\|_u \\ &= \max_{\|\boldsymbol{y}\|_u=1}\|\boldsymbol{Ay}\|_u = \max_{\|\boldsymbol{x}\|_u=1}\|\boldsymbol{Ax}\|_u \end{aligned} \tag{5.2.6}$$

从几何上看式 (5.2.5)，说明矩阵范数 $\|\boldsymbol{A}\|$ 反映了线性映射 $\boldsymbol{A}$ 把一个向量 $\boldsymbol{x}$ 映射为另一个向量 $\boldsymbol{Ax}$ 后，向量的“长度”缩放的比例的上界.

注意到 $\|\boldsymbol{A}\| \geqslant \dfrac{\|\boldsymbol{Ax}\|_u}{\|\boldsymbol{x}\|_v}$，即 $\|\boldsymbol{Ax}\|_u \leqslant \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{x}\|_v$，这显然让人联想到矩阵乘积的范数不超过范数的乘积. 考虑到矩阵乘法在矩阵运算中的重要地位，因此讨论矩阵范数时一般要附加“**相容性条件**”.

定义 5.2.3 (**矩阵范数的相容性**)对任意 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{m\times n}$，$\boldsymbol{B} \in \mathbb{F}^{n\times p}$ 及矩阵范数 ϕ,φ,γ，如果

$$\phi(\boldsymbol{AB}) \leqslant \varphi(\boldsymbol{A})\gamma(\boldsymbol{B}) \tag{5.2.7}$$

也就是

$$\|\boldsymbol{AB}\|_\phi \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_\varphi \|\boldsymbol{B}\|_\gamma \tag{5.2.8}$$

则称矩阵范数 ϕ,φ 和 γ 是**相容的**(compatible). 特别地，当 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是同阶方阵且矩阵范数 ϕ,φ 和 γ 相同时，式 (5.2.8) 就变成了

$$\|\boldsymbol{AB}\|_\varphi \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_\varphi \|\boldsymbol{B}\|_\varphi \tag{5.2.9}$$

此时，我们称矩阵范数 φ 是自相容的矩阵范数，简称为**相容范数**(compatible norm).

另外，如果矩阵 $\boldsymbol{B}$ 退化为列向量 $\boldsymbol{x}$，矩阵范数 ϕ,γ 退化为同一个向量范数 u 时，式 (5.2.8) 就变成了

$$\|\boldsymbol{Ax}\|_u \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_\varphi \|\boldsymbol{x}\|_u \tag{5.2.10}$$

此时,我们称**矩阵范数 φ 与向量范数 u 是相容的.**

例 5.2.4 矩阵的 m_1 范数和 F 范数都具备"相容性条件",即成立

$$\|\boldsymbol{AB}\|_{m_1} \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_{m_1}\|\boldsymbol{B}\|_{m_1}, \|\boldsymbol{AB}\|_F \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_F\|\boldsymbol{B}\|_F$$

证明:对任意 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{F}^{n\times n}$,有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{AB}\|_{m_1} &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big|\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}\Big| \leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big(\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}||b_{kj}|\Big)\\ &\leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big[\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\cdot\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}|\Big] \quad (\text{Cauchy-Schwartz 不等式})\\ &= \sum_{i=1}^{n}\Big[\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\cdot\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}|\Big] \quad \Big(\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\text{ 与 } j \text{ 无关,外提}\Big)\\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\cdot\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}| \quad \Big(\text{同上,}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}|\text{ 与 } i \text{ 无关,外提}\Big)\\ &= \|\boldsymbol{A}\|_{m_1}\|\boldsymbol{B}\|_{m_1}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{AB}\|_F^2 &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big|\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}\Big|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big(\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}||b_{kj}|\Big)^2\\ &\leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Big[\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|^2\cdot\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}|^2\Big] \quad (\text{Cauchy-Schwartz 不等式})\\ &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|^2\cdot\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|b_{kj}|^2 \quad (\text{外提})\\ &= \|\boldsymbol{A}\|_F^2\cdot\|\boldsymbol{B}\|_F^2\end{aligned}$$

即 $\|\boldsymbol{AB}\|_F \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_F\|\boldsymbol{B}\|_F$. 证毕.

显然,此例说明矩阵的 m_1 范数和 F 范数都是相容范数,但令人遗憾的是矩阵的 m_∞ 范数却不满足"相容性条件". 例如对于矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$,就有

$$\|\boldsymbol{A}^2\|_{m_\infty} = \|2\boldsymbol{A}\|_{m_\infty} = 2 > 1 = \|\boldsymbol{A}\|_{m_\infty}$$

要使 m_∞ 范数满足"相容性条件",则可以修正其定义为

$$\|\boldsymbol{A}\|_{m_\infty} = n\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant m,1\leqslant j\leqslant n}|a_{ij}| \tag{5.2.11}$$

可以证明,按式(5.2.11)重新定义的 m_∞ 范数满足相容性条件. 请读者补上这个证明.

定理 5.2.1 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的 F 范数与 $\mathbb{F}^n$ 上的 2 范数是相容的.

证明:
$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{Ax}\|_2^2 &= \sum_{i=1}^{m}\Big|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\Big|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{m}\Big(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}||x_j|\Big)^2\\ &= \sum_{i=1}^{m}\Big[\Big(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\Big)\Big(\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2\Big)\Big] \quad (\text{Cauchy-Schwartz 不等式})\\ &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\cdot\Big(\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2\Big) = \|\boldsymbol{A}\|_F^2\|\boldsymbol{x}\|_2^2\end{aligned}$$

即 $\|\boldsymbol{Ax}\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_F\|\boldsymbol{x}\|_2$. 证毕.

根据算子范数的定义式 (5.2.6)，当向量范数 u 分别取 $\|\boldsymbol{x}\|_1$、$\|\boldsymbol{x}\|_2$、$\|\boldsymbol{x}\|_\infty$ 及 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 时，可分别诱导出与向量范数相容的矩阵范数 $\varphi(\boldsymbol{A})$，分别称为 1 范数、2 范数、∞范数和 p 范数，并分别记为 $\|\boldsymbol{A}\|_1$、$\|\boldsymbol{A}\|_2$、$\|\boldsymbol{A}\|_\infty$及 $\|\boldsymbol{A}\|_p$.

我们先来推导 $\|\boldsymbol{A}\|_1$ 和 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$的表示定理.

设任意矩阵 $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n) \in \mathbb{F}^{m\times n}$，考虑向量 1 范数单位球：

$$S = \{\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{F}^n \mid \|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant 1\}$$

在 $\boldsymbol{A}$ 下的像 $\boldsymbol{Ax}$ 满足

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{Ax}\|_1 &= \Big\| \sum_{j=1}^{n} x_j \boldsymbol{\alpha}_j \Big\|_1 \leqslant \sum_{j=1}^{n} (|x_j| \cdot \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1) \text{（三角不等式和正齐性）} \\ &\leqslant (\max_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1) \cdot (\sum_{j=1}^{n} |x_j|) = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1 \cdot \|x\|_1 \\ &= \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1,\end{aligned}$$

从而 $\|\boldsymbol{Ax}\|_1 \leqslant \max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1$.

如果 $\max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1 = \|\boldsymbol{\alpha}_k\|_1$，则选取 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_k$，此时由 $\|\boldsymbol{e}_k\|_1 = 1$，可得

$$\|\boldsymbol{Ae}_k\|_1 = \|\boldsymbol{\alpha}_k\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1$$

因此 $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1 = \max\limits_{1\leqslant j\leqslant n} \sum\limits_{i=1}^{m} |a_{ij}|$，即 $\|\boldsymbol{A}\|_1$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的各个列向量的 1 范数的最大值，所以 $\|\boldsymbol{A}\|_1$ 即 1 范数又被称为**列和范数**(column sum norm).

类似地，可得到 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$，即 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$是 $\boldsymbol{A}$ 的各个行向量的 ∞范数的最大值，所以 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$即 ∞范数又称为**行和范数**(row sum norm).

综合上述分析，三种算子范数具有如下的表示定理：

定理 5.2.2　(算子范数的表示定理) 对 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，有

$$\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \|\boldsymbol{\alpha}_j\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}| \tag{5.2.12}$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \tag{5.2.13}$$

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})} \tag{5.2.14}$$

证明：前两个表达式前已证明. 下面证明第三个表达式即 2 范数的表达式.

易证 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} \geqslant 0$. 设 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \lambda_n \geqslant 0$，对应的完备正交系为 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n$，则对于任意的 2 范数单位向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{F}^n$（即 $\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$），必存在一组复数 $z_1, z_2, \cdots, z_n$，使得

$$\boldsymbol{x} = z_1\boldsymbol{x}_1 + z_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + z_n\boldsymbol{x}_n$$

由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} z_i\boldsymbol{x}_i = \sum\limits_{i=1}^{n} z_i(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i) = \sum\limits_{i=1}^{n} z_i(\lambda_i\boldsymbol{x}_i)$，因此

$$\|\boldsymbol{Ax}\|_2^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}) = \left(\sum_{i=1}^{n} \bar{z}_i \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\right)\left[\sum_{i=1}^{n} z_i(\lambda_i \boldsymbol{x}_i)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |z_i|^2 \leqslant \lambda_1 \sum_{i=1}^{n} |z_i|^2 = \lambda_1 \|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \lambda_1$$

所以 $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|_2=1} \|\boldsymbol{Ax}\|_2 \leqslant \sqrt{\lambda_1}$.

另外,注意到 $\|\boldsymbol{x}_1\|_2 = 1$, 且 $\|\boldsymbol{Ax}_1\|_2^2 = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}_1 = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\lambda_1\boldsymbol{x}_1 = \lambda_1$. 因此

$$\|\boldsymbol{A}\|_2 = \max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=1} \|\boldsymbol{Ax}\|_2 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{\lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})}$$

证毕.

注意,矩阵的 2 范数因为涉及特征值,又称为**谱范数**(spectral norm).

请读者要特别注意的是,当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 退化为列向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{F}^n$ 时,矩阵范数 $\|\boldsymbol{A}\|_1$ 与向量范数 $\|\boldsymbol{x}\|_1$ 一致, $\|\boldsymbol{A}\|_\infty$与 $\|\boldsymbol{x}\|_\infty$也一致,但 $\|\boldsymbol{A}\|_2$ 与 $\|x\|_2$ 就不一致了.

我们同样从几何上再来直观理解这三种算子范数.

例 5.2.5　分别求矩阵 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ 的 1 范数、2 范数和 ∞范数,并考察与它们对应的三种向量范数的闭单位圆 $S = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^2 \mid \|\boldsymbol{x}\| \leqslant 1\}$ 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 作用下的效果.

解:经过简单计算可知 $\|\boldsymbol{A}\|_1 = 4$, $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = 3$, $\|\boldsymbol{A}\|_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(9+\sqrt{65})} \approx 2.9208$.

对 $\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 显然 $\boldsymbol{Ae}_1 = \boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{Ae}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{Ae}_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$.

$\|\boldsymbol{e}_1\|_1 = \|\boldsymbol{e}_1\|_2 = \|\boldsymbol{e}_1\|_\infty = 1$, $\|\boldsymbol{e}_2\|_1 = \|\boldsymbol{e}_2\|_\infty = 1$, $\|\boldsymbol{e}_2\|_2 = 2\sqrt{2}$;

$\|\boldsymbol{Ae}_1\|_1 = 1 \cdot \|\boldsymbol{e}_1\|_1$, $\|\boldsymbol{Ae}_2\|_1 = \|(2,2)^{\mathrm{T}}\|_1 = \|\boldsymbol{A}\|_1 \|\boldsymbol{e}_2\|_1$;

$\|\boldsymbol{Ae}_1\|_2 = 1 \cdot \|\boldsymbol{e}_1\|_2$, $\|\boldsymbol{Ae}_2\|_2 = \|(2,2)^{\mathrm{T}}\|_1 = 2\sqrt{2} \approx \|\boldsymbol{A}\|_2 \|\boldsymbol{e}_2\|_2$;

$\|\boldsymbol{Ae}_2\|_\infty = \|(2,2)^{\mathrm{T}}\|_\infty = 2 \cdot \|\boldsymbol{e}_2\|_\infty$, $\|\boldsymbol{Ae}_3\|_\infty = \|\boldsymbol{A}\|_\infty \|\boldsymbol{e}_3\|_\infty$.

闭单位圆 S 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 作用下的三种度量效果如图 5－4 所示.

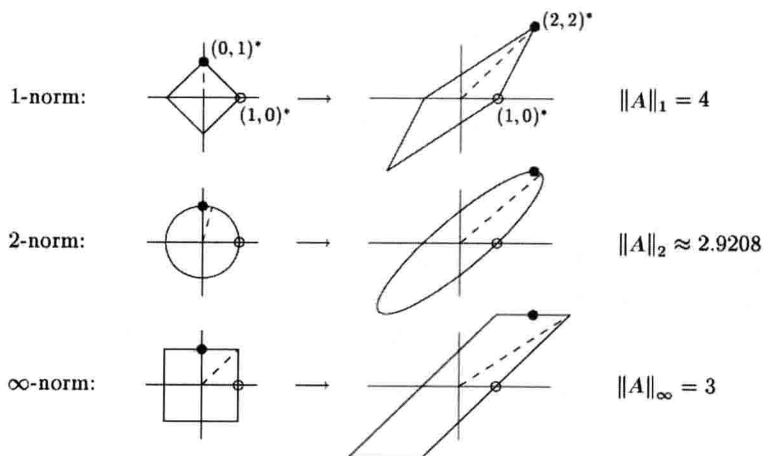


图 5－4　三种矩阵范数的效果

在 Matlab 中，内置函数 norm 同样可用于计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的算子范数，调用格式分别为

```
norm(A,1) ,norm(A,'inf') ,norm(A,2)
```

其中，`norm(A,2)`常缺省为 `norm(A)`.

5.2.3　矩阵范数的几个性质

由于 $\mathbb{C}^{m\times n}$ 是复数域上的 mn 维线性空间，因此由定理 5.1.5，向量范数的等价性也可推广到矩阵范数.

定理 5.2.3　(**矩阵范数的等价性**)对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$，设 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 和 $\phi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{C}^{m\times n}$ 上的两个矩阵范数，则必存在正数 c_1,c_2，使得

$$c_1\phi(\boldsymbol{A})\leqslant\varphi(\boldsymbol{A})\leqslant c_2\phi(\boldsymbol{A})\tag{5.2.15}$$

证明：略.

定理 5.2.4　(**谱范数的性质**) $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的谱范数具有下列性质：

(1) $\|\boldsymbol{A}\|_2=\max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}|$，其中 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{F}^n,\boldsymbol{y}\in\mathbb{F}^m$ 且 $\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1$；

(2) $\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2$；

(3) $\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2^2$.

证明：(1)由 Cauchy-Schwartz 不等式，并注意到 $\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1$ 及相容性，则

$$|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}|\leqslant\|\boldsymbol{y}\|_2\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2$$

设有 $\boldsymbol{x}_0\in\mathbb{F}^n$ 且 $\|\boldsymbol{x}_0\|_2=1$ 使得 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2$，令 $d=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_2$，$\boldsymbol{y}_0=\dfrac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0}{d}$，则有

$$|\boldsymbol{y}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0|=\frac{1}{d}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0)^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0)=\frac{1}{d}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_2^2=d=\|\boldsymbol{A}\|_2$$

因此 $\|\boldsymbol{A}\|_2=\max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}|,\boldsymbol{x}\in\mathbb{F}^n,\boldsymbol{y}\in\mathbb{F}^m$.

(2)令 $z=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，则 $\bar{z}=z^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$ 且 $|\bar{z}|=|z|$，因此由(1)可知

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}\|_2&=\max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}|=\max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1}|\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}|\\&=\max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}|=\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_2\end{aligned}$$

(3)由矩阵范数的相容性及(2)可知，$\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\|_2\leqslant\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_2\|\boldsymbol{A}\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2^2$.

设有向量 $\boldsymbol{x}_0\in\mathbb{F}^n$ 且 $\|\boldsymbol{x}_0\|_2=1$ 使得 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2$，则

$$\|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\|_2\leqslant\max_{\|\boldsymbol{x}_0\|_2=1}|\boldsymbol{x}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0|=\max_{\|\boldsymbol{x}_0\|_2=1}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|_2^2=\|\boldsymbol{A}\|_2^2$$

证毕.

向量的 Euclid 范数具有酉不变性，F 范数和谱范数作为它的推广(哪一个更“正宗”?)，是否也具有酉不变性呢?

定理 5.2.5　(**矩阵范数的酉不变性**) $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的 F 范数和谱范数都是酉不变的，即对任意酉矩阵 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，均有

$$\|UA\|_F = \|A\|_F = \|AV\|_F, \|UA\|_2 = \|A\|_2 = \|AV\|_2$$

证明: 令 $A = (\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n) \in \mathbb{F}^{m\times n}$. 由于 $U\alpha_j$ 是列向量,因此 $\|U\alpha_j\|_F = \|U\alpha_j\|_2$,再联想到 Euclid 范数的酉不变性,可知 $\|U\alpha_j\|_F = \|U\alpha_j\|_2 = \|\alpha_j\|_2$,从而

$$\|UA\|_F^2 = \|(U\alpha_1, U\alpha_2, \cdots, U\alpha_n)\|_F^2 = \sum_{j=1}^{n} \|U\alpha_j\|_F^2 = \sum_{j=1}^{n} \|\alpha_j\|_2^2 = \|A\|_F^2$$

此即 $\|UA\|_F = \|A\|_F$. 利用这个结论和 $\|A^H\|_2 = \|A\|_2$,可知

$$\|AV\|_F = \|(AV)^H\|_F = \|V^H A^H\|_F = \|A^H\|_F$$

对于谱范数的情形,利用定义和 Euclid 范数的酉不变性,即有

$$\|UA\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|UAx\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \|A\|_2$$

证毕.

对于谱范数,定理的结论还可以推广到半酉矩阵 U, V. 亲爱的读者,你能证明它吗?

矩阵 A 的 SVD 即 $A = U\Sigma V^H$ 采用的是酉相似,这样对 A 的研究就转化为对其标准型 Σ 的研究. 既然 A 的 F 范数和谱范数都是酉不变的,那么用奇异值就能表示它们.

定理 5.2.6 (范数与奇异值) 对任意矩阵 $A \in \mathbb{F}^{m\times n}$,设 $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$ 表示矩阵 A 的 r 个非零奇异值,其中 $r = r(A)$,则

(1) $\|A\|_2 = \sigma_1, \|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_r^2}$;

(2) $\|A\|_2 \leqslant \|A\|_F$,等号成立当且仅当 $r(A) = 1$.

证明: (1)设 A 的 SVD 为 $A = U\Sigma V^H$,则

$$\begin{aligned}
\|A\|_2 &= \|U\Sigma V^H\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|\Sigma x\|_2 \\
&= \max_{\|x\|_2=1} (|\sigma_1 x_1|^2 + |\sigma_2 x_2|^2 + \cdots + |\sigma_r x_r|^2)^{\frac{1}{2}} \\
&\leqslant \sigma_1 \max_{\|x\|_2=1} (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_r|^2)^{\frac{1}{2}} \\
&\leqslant \sigma_1 \max_{\|x\|_2=1} (|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_r|^2 + |x_{r+1}|^2 + \cdots + |x_n|^2)^{\frac{1}{2}} \\
&= \sigma_1 \max_{\|x\|_2=1} \|x\|_2 = \sigma_1
\end{aligned}$$

$$\|A\|_F = \|U\Sigma V^H\|_F = \|\Sigma\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_r^2}$$

(2)的结论从(1)中可显然得出. 证毕.

这仅仅是 SVD 小试牛刀,它的巨大威力后文还会逐渐展开.

定理 5.2.7 (矩阵范数与向量范数的相容性) 设 φ 为 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的任意矩阵范数,$y_0 \in \mathbb{F}^n$ 为给定的非零向量,则

$$u(x) = \varphi(x y_0^H), \quad x \in \mathbb{F}^n$$

是与 φ 相容的向量范数.

证明: 当且仅当 $x \neq 0$ 时 $x y_0^H \neq O$,即 $u(x) = \varphi(x y_0^H) > 0$;当且仅当 $x = 0$ 时 $x y_0^H = O$,即 $u(x) = \varphi(O) = 0$. 正定性和齐次性类似也不难证明. 因此 u 是 $\mathbb{F}^n$ 上的向量

范数.

注意到对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$, $u(\boldsymbol{Ax})=\varphi(\boldsymbol{Axy}_0^{\mathrm{H}})\leqslant\varphi(\boldsymbol{A})\varphi(\boldsymbol{xy}_0^{\mathrm{H}})=\varphi(\boldsymbol{A})u(\boldsymbol{x})$, 因此 u 还是与 φ 相容的向量范数. 证毕.

由于 $\boldsymbol{y}_0$ 不是唯一的,因此定理 5.2.7 中的向量范数 u 也不是唯一的. 事实上,矩阵范数与向量范数的相容性关系比较复杂. 概而言之,对任意给定的矩阵范数,一定存在与之相容的向量范数,但这样的向量范数未必唯一;反之,对任意给定的向量范数,也一定存在与之相容的矩阵范数,但这样的矩阵范数也未必唯一.

对与某向量范数 u 相容的矩阵范数 φ 而言, $\varphi(\boldsymbol{I})=\|\boldsymbol{I}\|\geqslant 1$, 因为 $u(\boldsymbol{x})=u(\boldsymbol{Ix})\leqslant\varphi(\boldsymbol{I})u(\boldsymbol{x})$, 但是对算子范数 φ (按定义 φ 与相应的向量范数相容),则有 $\varphi(\boldsymbol{I})=\|\boldsymbol{I}\|=1$, 因为此时

$$\varphi(\boldsymbol{I})=\max_{u(\boldsymbol{x})=1}u(\boldsymbol{Ix})=\max_{u(\boldsymbol{x})=1}u(\boldsymbol{x})=1$$

定理 5.2.7 也提供了一种从矩阵范数出发来构造向量范数的方法. 事实上,当 $\boldsymbol{y}_0=\boldsymbol{e}_i$ 即单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 的第 i 列(i 任意指定)时,若矩阵范数 φ 分别取 m_1 范数、F 范数、2 范数或 ∞范数,则向量范数 u 就是相应的 1 范数、2 范数、2 范数和 ∞范数. 至于从向量范数出发来构造矩阵范数的方法,算子范数显然已经给出了一种解决之道.

5.3 范数的几个应用

长度和距离在实分析和复分析中的应用,我们已经有充分认识,而范数是长度和距离的推广,因此范数作为一种推广的度量,由于其抽象性和概括性,其应用范围自然也随之扩展. 至少在矩阵分析与计算领域,范数有着许多深刻的应用. 当然,从本质上讲,范数就是线性空间 V 上的一种映射或函数(大多不是线性的). 我们已经见识了线性空间的浩淼波涛,再加上映射或变换的丰富多彩,如此就不难想象范数的深邃幽深了.

5.3.1 谱半径与矩阵范数

设 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 为方阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意特征对,即 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$, 考虑到范数相容性,可知

$$|\lambda|\cdot\|\boldsymbol{x}\|=\|\lambda\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{Ax}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{x}\|$$

因为特征向量 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$, 此即 $\|\boldsymbol{x}\|>0$, 从而 $|\lambda|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|$. 这说明矩阵特征值的模都不超过它的范数.

定义 5.3.1 若 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,则称 $\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**谱半径**(spectral radius),记为 $\rho(\boldsymbol{A})$. 特别地,称满足 $\rho(\boldsymbol{A})=|\lambda|$ 的特征值 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的**优势特征值**(dominant eigenvalue),对应的特征向量 $\boldsymbol{x}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的**优势特征向量**(dominant eigenvector),相应的特征对 (λ,x) 为 $\boldsymbol{A}$ 的**优势特征对**(dominant eigenpair).

思考:这里的谱是什么意思? 谱半径的名称又如何理解? 谱半径是矩阵范数吗?

定理 5.3.1 对 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ 的任意矩阵范数 $\|\boldsymbol{A}\|$, 恒有

$$\rho(\boldsymbol{A})\leqslant\|\boldsymbol{A}\| \tag{5.3.1}$$

特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵时，等号对 2 范数成立.

证明：$\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$ 的证明前已给出.

当 $\boldsymbol{A}$ 是正规阵时，有谱分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，从而 $\|\boldsymbol{A}\|_2=\|\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}\|_2=\|\boldsymbol{\Lambda}\|_2$. 由定理 5.2.6 和推论 4.4.1 可知 $\|\boldsymbol{\Lambda}\|_2=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|=\rho(\boldsymbol{A})$，从而 $\|\boldsymbol{A}\|_2=\rho(\boldsymbol{A})_2$. 证毕.

另外，根据矩阵范数的相容性，可知 $\|\boldsymbol{A}^k\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|^k$，因此 $\rho(\boldsymbol{A}^k)\leqslant\rho(\boldsymbol{A})^k$.

例 5.3.1 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0\\ -4 & 3 & 0\\ 1 & 0 & 2\end{pmatrix}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})$.

解：例 2.5.1 中已算出 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 2,1,1，因此 $\rho(\boldsymbol{A})=2$.

在 Matlab 中，使用内置函数 vrho 或直接使用其定义代码

```
max(abs(eig(A)))
```

可以计算出方阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})$.

定理 5.3.1 给出了矩阵谱半径的一个上界，那么矩阵谱半径的下界是什么呢？

定理 5.3.2 对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$，存在 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的**某种**矩阵范数 $\varphi(\boldsymbol{A})$，使得对任意 $\varepsilon>0$，恒有

$$\varphi(\boldsymbol{A})-\varepsilon\leqslant\rho(\boldsymbol{A}) \tag{5.3.2}$$

注意：这里的矩阵范数 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有关.

证明：对任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，存在 Jordan 标准型

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & k_1 & & \\ & \lambda_2 & \ddots & \\ & & \ddots & k_{n-1}\\ & & & \lambda_n\end{pmatrix}=\boldsymbol{\Lambda}+\boldsymbol{N}$$

这里，$k_i=0$ 或 1，$\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，$\boldsymbol{N}=\begin{pmatrix}0 & k_1 & & \\ & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & k_{n-1}\\ & & & 0\end{pmatrix}$.

令 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(1,\varepsilon,\varepsilon^2,\cdots,\varepsilon^{n-1})$，则 $\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{APD}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{JD}=\boldsymbol{\Lambda}+\varepsilon\boldsymbol{N}$. 再令 $\varphi(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS}\|_\infty$，这里 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{PD}$，易证 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的一种矩阵范数，从而

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{A})&=\|\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS}\|_\infty=\max_{1\leqslant i\leqslant n}(|\lambda_i|+\varepsilon k_i)\leqslant\max_{1\leqslant i\leqslant n}(|\lambda_i|+\varepsilon)\\ &=\max_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|+\varepsilon=\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon\end{aligned}$$

证毕.

这个优美的证明是奥斯特洛斯基（请不要与《钢铁是怎样炼成的》的作者尼·奥斯特洛夫斯基混淆）在 1960 年给出的. 奥斯特洛斯基（Alexander Ostrowski，见图 5－5）出生于基辅，后被推荐至德国马堡大学，师从亨泽尔（Kurt Hensel，1861－1941，p 进数[不是 p

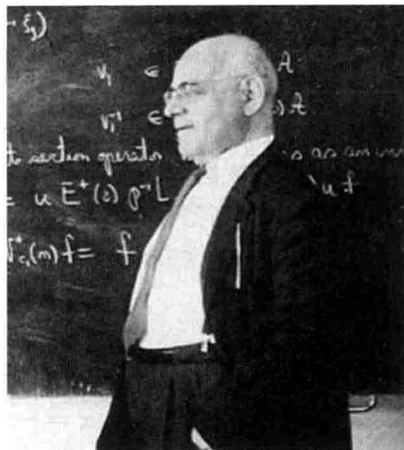


图 5-5　奥斯特洛斯基(1893—1986)

进制数]的发现者). 第一次世界大战中,作为敌国之人,他的行动严重受限制,但所幸经亨泽尔苦苦恳求,德国当局同意让奥斯特洛斯基使用图书馆. 战后,在希尔伯特和兰道(Edmund Georg Herman Landau, 1877—1938,写作以行文精练简洁著称,被称为兰道风格)指导下,他获得哥廷根大学博士学位. 6 年后,他开始担任巴塞尔大学(瑞士最古老的大学,欧拉和发现洛必达法则的约翰 · 伯努利(John Bernoulli)都是该校校友)数学系系主任,直至退休.

在矩阵分析与计算领域,奥斯特洛斯基最著名的工作是关于范数的一般性理论及其在发现不等式、研究求解线性方程组的方法,以及发现和逼近特征值等方面的应用. 事实上,他一生共发表 270 余篇(本)著作,涉及代数(线性代数、多重线性代数、形式代数、数论)、几何、拓扑、函数论、数值分析等领域. 他既能强调数学的抽象与公理化,又能着力于数学的具体和构造性,可谓理论与应用并重,"是无与伦比的大师"!

奥斯特洛斯基离世不久,遵其遗愿,以他留下的遗产为基础建立了奥斯特洛斯基基金会,并颁发国际性的奥斯特洛斯基奖,每两年一次,以奖励一、二位最近五年在纯粹数学或数值分析的基础理论方面有突出成就的数学家.

例 5.3.2　设 $\boldsymbol{\alpha}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 的单位列向量,即 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}=1$. 令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}$, 则

(1) $\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}$; (2) $\rho(\boldsymbol{B})=1$; (3) $\|\boldsymbol{B}\|_2=1$.

证明:(1)因为 $\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}=1$, 所以

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}^2&=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\\&=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}\end{aligned}$$

(2)因为 $(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\alpha})=\boldsymbol{\alpha}=1\cdot\boldsymbol{\alpha}$, $r(\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}})=1$, 并且 $\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}$ 是对称矩阵,所以 1 是矩阵 $\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}$ 唯一的非零特征值,因此,矩阵 $\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}$ 的特征值为 $1,0,0,\cdots,0$, 即矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的特征值为 $0,1,1,\cdots,1$, 从而 $\rho(\boldsymbol{B})=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|\lambda_i|=1$.

(3)因为 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}$, 所以 $\boldsymbol{B}$ 是对称矩阵,因而也是正规矩阵,由定理 5.3.1 可知 $\|\boldsymbol{B}\|_2=1$.

思考:除了 2 范数,前面的矩阵范数几乎都只是对矩阵元素简单和低级的加工. 而与之相比,谱半径的计算显然要复杂得多. 如此来说,引入谱半径的意义又何在呢?

5.3.2　线性方程组解与矩阵逆的扰动分析

例 5.3.3　线性方程组

$$\begin{pmatrix}1&0.99\\0.99&0.98\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\tag{5.3.3}$$

的精确解为 $x_1=100, x_2=-100$. 如果系数矩阵和常数项有**扰动**(perturbation) $\begin{pmatrix}0&0\\0&0.01\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}0\\0.001\end{pmatrix}$, 则**扰动线性方程组**(perturbated linear systems)为

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.99 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1.001 \end{pmatrix}$$

它的精确解为 $x_1+\delta x_1=-0.1, x_2+\delta x_2=10/9$. 显然,由于系统(5.3.3)本身的固有性质,原始数据的小扰动引起了解的很大变化,因此它是病态的(敏感的)或不稳定的.

下面我们用范数来定量分析系数矩阵和常数项的扰动对线性方程组解的影响.

设非奇异线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 经扰动后仍有唯一解 $\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$, 即成立

$$(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$$

因此 $\boldsymbol{A}\cdot\Delta\boldsymbol{x}=-\Delta\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{b}-\Delta\boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x}$, 即

$$\Delta\boldsymbol{x}=-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}\Delta\boldsymbol{x}$$

两边取范数,并利用三角不等式和范数的相容性,缩放可得

$$\|\Delta\boldsymbol{x}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{b}\|+\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{x}\|$$

显然,如果有 $\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|<1$, 则可得到**绝对误差**(absolute error)**估计式**

$$\|\Delta\boldsymbol{x}\|\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|}(\|\Delta\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{x}\|+\|\Delta\boldsymbol{b}\|)$$

也就是
$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|}\left(\|\Delta\boldsymbol{A}\|+\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\right)$$

再由 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 可得 $\|\boldsymbol{b}\|=\|\boldsymbol{Ax}\|\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{x}\|$, 即 $\frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|}\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$, 因此

$$\begin{aligned}\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|}&\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\Delta\boldsymbol{A}\|}\left(\|\Delta\boldsymbol{A}\|+\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\|\boldsymbol{A}\|\right)\\&=\frac{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\boldsymbol{A}\|}{1-\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\boldsymbol{A}\|\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}}\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}+\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\right)\\&=\frac{\kappa}{\gamma}\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}+\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\right)\end{aligned}\tag{5.3.4}$$

这里,$\kappa=\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\boldsymbol{A}\|$, $\gamma=1-\kappa\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}$. 式(5.3.4)被称为**相对误差**(relative error)估计式.

显然在式(5.3.4)中,系数 κ 反映了方程组解 $\boldsymbol{x}$ 的相对误差对于系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和常数项 $\boldsymbol{b}$ 的相对误差的依赖程度. κ 越大,方程组解的相对误差也越大. 因此 κ 类似于微积分中的导数.

定义 5.3.2　对非奇异线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$, 称数 $\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\cdot\|\boldsymbol{A}\|$ 为求解此线性方程组的**条件数**(condition number),记为 cond $(\boldsymbol{A})$ 或 $\kappa(\boldsymbol{A})$. 特别地,范数为 1 范数时记为 $\kappa_1(\boldsymbol{A})$, 为 2 范数时记为 $\kappa_2(\boldsymbol{A})$, 为 ∞范数时记为 $\kappa_\infty(\boldsymbol{A})$.

问题是非奇异线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 经过扰动后未必有唯一解,那么何种扰动能使得扰动后的矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A}$ 仍然可逆? 扰动对逆矩阵又有何影响?

由于 $\boldsymbol{B}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})\boldsymbol{B}^{-1}=-\boldsymbol{A}^{-1}\Delta\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}^{-1}$, 两边取范数,并缩放,得

$$\|B^{-1}-A^{-1}\|\leqslant\|A^{-1}\|\cdot\|B^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|$$

因此

$$\frac{\|B^{-1}-A^{-1}\|}{\|A^{-1}\|}\leqslant\|B^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|\leqslant\|A\|\cdot\|B^{-1}\|\cdot\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\tag{5.3.5}$$

观察式(5.3.5)可知,下一步需要缩放 $\|B^{-1}\|$.

由于 $B=A+\Delta A=A(I+A^{-1}\Delta A)$,若假定 $I+A^{-1}\Delta A$ 可逆,则 $B^{-1}=(I+A^{-1}\Delta A)A^{-1}$,两边取范数,并缩放,得

$$\|B^{-1}\|\leqslant\|(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}\|\cdot\|A^{-1}\|\tag{5.3.6}$$

将之代入式(5.3.5),可知

$$\frac{\|B^{-1}-A^{-1}\|}{\|A^{-1}\|}\leqslant\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\|(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}\|\cdot\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\tag{5.3.7}$$

显然,在式(5.3.7)中,需要进一步缩放 $\|(I+A^{-1}\Delta A)^{-1}\|$.

令 $C=-A^{-1}\Delta A$,由于

$$I=(I-C)^{-1}(I-C)=(I-C)^{-1}-(I-C)^{-1}C$$

即 $(I-C)^{-1}=I+(I-C)^{-1}C$,两边取范数,并缩放,得

$$\|(I-C)^{-1}\|\leqslant\|I\|+\|(I-C)^{-1}\|\cdot\|C\|$$

若有条件 $\|C\|\leqslant 1$,则由上式可知 $\|(I-C)^{-1}\|\leqslant\dfrac{\|I\|}{1-\|C\|}$,此时 C 的任意特征值 $|\lambda|\leqslant\|C\|\leqslant 1$,从而 $I\pm C$ 的特征值 $1\pm\lambda\in(0,2)$ 或 $(-2,0)$,均不包含零,因此矩阵 $I\pm C$ 是可逆的.

综合上述分析,即得如下的定理.

定理 5.3.3　对任意 $C\in\mathbb{F}^{n\times n}$,如果 $\|C\|\leqslant 1$,则矩阵 $I\pm C$ 非奇异,且

$$\|(I-C)^{-1}\|\leqslant\frac{\|I\|}{1-\|C\|}\tag{5.3.8}$$

在前面的分析中,由于 $C=-A^{-1}\Delta A$,若将条件 $\|C\|\leqslant 1$ 修改为 $\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|\leqslant 1$,则

$$\|C\|=\|-A^{-1}\Delta A\|\leqslant\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|\leqslant 1\tag{5.3.9}$$

即仍有 $\|C\|\leqslant 1$. 如果再假定 $\|I\|=1$,则由定理 5.3.3 和式(5.3.9)可知,式(5.3.6)就变成了

$$\begin{aligned}\|B^{-1}\|&\leqslant\frac{1}{1-\|C\|}\|A^{-1}\|=\frac{1}{1-\|-A^{-1}\Delta A\|}\\\|A^{-1}\|&\leqslant\frac{1}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|}\\\|A^{-1}\|&=\frac{1}{1-\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\dfrac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}\|A^{-1}\|\end{aligned}\tag{5.3.10}$$

也就是修正后的绝对误差估计式

$$\|\boldsymbol{B}^{-1}\| \leqslant \frac{1}{\gamma}\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \tag{5.3.11}$$

将式 (5.3.11) 代入式 (5.3.5)，即得修正后的相对误差估计式

$$\frac{\|\boldsymbol{B}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\|}{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|} \leqslant \|\boldsymbol{A}\| \cdot \frac{1}{\gamma}\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|} = \frac{\kappa}{\gamma} \cdot \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|} \tag{5.3.12}$$

定义 5.3.3 对非奇异矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{n\times n}$，称数 $\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\boldsymbol{A}\|$ 为 $\boldsymbol{A}$ 关于求逆的条件数，也记为 cond ($\boldsymbol{A}$) 或 $\kappa(\boldsymbol{A})$. 另外 $\kappa_1(\boldsymbol{A})$，$\kappa_2(\boldsymbol{A})$ 和 $\kappa_\infty(\boldsymbol{A})$ 的含义同定义 5.3.2.

定理 5.3.4 设 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ 非奇异，且 $\|\boldsymbol{I}\| = 1$. 如果扰动矩阵 $\Delta\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{n\times n}$ 满足条件

$$\|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta\boldsymbol{A}\| \leqslant 1 \tag{5.3.13}$$

则：(1)扰动后的矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，且绝对误差估计式和相对误差估计式分别为

$$\|\boldsymbol{B}^{-1}\| = \frac{1}{\gamma}\|\boldsymbol{A}^{-1}\|, \quad \frac{\|\boldsymbol{B}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\|}{\|\boldsymbol{A}^{-1}\|} \leqslant \frac{\kappa}{\gamma} \cdot \frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}$$

(2)线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 被扰动后，得到的扰动线性方程组 $(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$ 有唯一解 $\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$，并且其解的相对误差估计式为

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leqslant \frac{\kappa}{\gamma}\left(\frac{\|\Delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}+\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\right)$$

Matlab 中提供了内置函数 cond，可用于计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 求逆和线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 求解的条件数(它们的计算表达式显然一样)，调用格式为 `c = cond(A,p)` 或 `c = cond(A)`，后者使用的是缺省的 2 范数.

一般而言，我们说条件数大的矩阵是病态的，但具体多大才算病态的，没有具体标准. 当然，实际使用中可参考最著名的病态矩阵即 Hilbert 矩阵. 采用 ∞范数，计算可知 $\kappa(\boldsymbol{H}_3)=748$，$\kappa(\boldsymbol{H}_6)\approx 2.9\times 10^7$，$\kappa(\boldsymbol{H}_{10})\approx 3.54\times 10^{13}$，显然增长非常迅速.

5.3.3 矩阵的低秩逼近及其应用

设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{m\times n}$ 的秩为 r，其 SVD 为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$，其中 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)$，$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)$. 将对角阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分解为 $\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{\Sigma}_1+\boldsymbol{\Sigma}_2+\cdots+\boldsymbol{\Sigma}_r$，这里 $\boldsymbol{\Sigma}_j=\sigma_j\boldsymbol{E}_{jj} \in \mathbb{F}^{m\times n}$，且 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} &= \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{U\Sigma}_2\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}+\cdots+\boldsymbol{U\Sigma}_r\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \\ &= \sigma_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}+\sigma_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\sigma_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}} \\ &= \sigma_1\boldsymbol{E}_1+\sigma_2\boldsymbol{E}_2+\cdots+\sigma_r\boldsymbol{E}_r\end{aligned} \tag{5.3.14}$$

其中，$\boldsymbol{E}_i=\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \in \mathbb{F}^{m\times n}$，显然对 $i=1,2,\cdots,r$ 都有 $r(\boldsymbol{E}_i)=1$，即矩阵 $\boldsymbol{E}_i$ 是**秩 1 矩阵**(rank one matrix)，因此式 (5.3.14) 也被称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**秩 1 分解**(rank one decomposition).

秩1分解让我们想到上一章提到的各种谱分解. 从动态的眼光来看,若记

$$\boldsymbol{A}_k = \sigma_1 \boldsymbol{E}_1 + \sigma_2 \boldsymbol{E}_2 + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{E}_k$$

显然,随着 k 的递增, $\boldsymbol{A}_k$ 应该逐渐接近 $\boldsymbol{A}$. 不仅如此,对某个固定的 k(这仿佛递增过程中的突然定格),在所有秩为 k 的矩阵中, $\boldsymbol{A}_k$ 离矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的"距离"最近,也即矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最佳秩 k 逼近(best rank-k approximation),或者换句话说,包含 $\boldsymbol{A}$ 中的"能量"最多的秩 k 矩阵是 $\boldsymbol{A}_k$.

定理 5.3.5　设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{m\times n}$ 的秩为 r, 其 SVD 为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$, 且 $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n)$, $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n)$, $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值. 对任意 $1 \leqslant k \leqslant r$, 记

$$\boldsymbol{U}_k = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k), \boldsymbol{V}_k = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k), \boldsymbol{\Sigma}_k = \sigma_1 \boldsymbol{E}_{11} + \sigma_2 \boldsymbol{E}_{22} + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{E}_{kk}$$

且 $k = r$ 时,规定 $\sigma_{k+1} = 0$. 若令

$$\boldsymbol{A}_k = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_k \boldsymbol{\Sigma}_k \boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}} \tag{5.3.15}$$

则

(1) $\min\limits_{r(\boldsymbol{B})=k} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\|_2 = \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k\|_2 = \sigma_{k+1}$; (5.3.16)

(2) $\min\limits_{r(\boldsymbol{B})=k} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\|_1 = \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k\|_1 = \sigma_{k+1}$; (5.3.17)

(3) $\min\limits_{r(\boldsymbol{B})=k} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\|_F^2 = \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k\|_F^2 = \sigma_{k+1}^2 + \sigma_{k+2}^2 + \cdots + \sigma_r^2$. (5.3.18)

证明:(1)显然 $k = r$ 时, $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A}$, 结论显然成立. 下设 $1 \leqslant k < r$.

由 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{V} = \boldsymbol{\Sigma}_k = \sigma_1 \boldsymbol{E}_{11} + \sigma_2 \boldsymbol{E}_{22} + \cdots + \sigma_k \boldsymbol{E}_{kk}$ 可知,

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k)\boldsymbol{V} = \sigma_{k+1} \boldsymbol{E}_{k+1,k+1} + \sigma_{k+2} \boldsymbol{E}_{k+2,k+2} + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{E}_{rr} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{r/k} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} \in \mathbb{F}^{m\times n}$$

其中, $\boldsymbol{\Sigma}_{r/k} = \mathrm{diag}(0, \cdots, 0, \sigma_{k+1}, \cdots, \sigma_r)$, 所以

$$\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k\|_2 = \|\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_k)\boldsymbol{V}\|_2 = \sigma_{k+1}$$

对任意秩 k 矩阵 $\boldsymbol{B} \in \mathbb{F}^{m\times n}$, 由定理 4.5.3 可知存在单位正交向量组 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_{n-k} \in \mathbb{C}^n$, 使得

$$N(\boldsymbol{B}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_{n-k})$$

因此,存在 2 范数单位向量 $\boldsymbol{z}$, 使得 $\boldsymbol{z} \in N(\boldsymbol{B}) \cap \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{k+1}) \neq \{\boldsymbol{0}\}$. 否则

$$\dim N(\boldsymbol{B}) + \dim \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{k+1}) = n + 1$$

这在维数上显然是不可能的.

令 $\boldsymbol{z} = t_1 \boldsymbol{v}_1 + t_2 \boldsymbol{v}_2 + \cdots + t_{k+1} \boldsymbol{v}_{k+1}$, 则对 $j = k+2, \cdots, r$, 有 $\sigma_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} = \sigma_j \boldsymbol{u}_j 0 = \boldsymbol{0}$, 因此

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{Az} &= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{u}_r \boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} \\
&= \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} + \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} + \cdots + \sigma_{k+1} \boldsymbol{u}_{k+1} \boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z} \\
&= \sigma_1 (\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z}) \boldsymbol{u}_1 + \sigma_2 (\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z}) \boldsymbol{u}_2 + \cdots + \sigma_{k+1} (\boldsymbol{v}_{k+1}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z}) \boldsymbol{u}_{k+1} \\
&= \sigma_1 t_1 \boldsymbol{u}_1 + \sigma_2 t_2 \boldsymbol{u}_2 + \cdots + \sigma_{k+1} t_{k+1} \boldsymbol{u}_{k+1}
\end{aligned}$$

注意到 $\boldsymbol{B}z=\boldsymbol{0}$ 且 $\|\boldsymbol{z}\|_2=1$，从而

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_2^2&=\max_{\|z\|_2=1}\|(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})\boldsymbol{z}\|_2^2\geqslant\|(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})\boldsymbol{z}\|_2^2=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\|_2^2\\&=\sigma_1^2t_1^2+\sigma_2^2t_2^2+\cdots+\sigma_{k+1}^2t_{k+1}^2\geqslant\sigma_{k+1}^2(t_1^2+t_2^2+\cdots+t_{k+1}^2)\\&=\sigma_{k+1}^2\|\boldsymbol{z}\|_2^2=\sigma_{k+1}^2\end{aligned}$$

(2)和(3)的证明与(1)类似，略去. 证毕.

从几何上看，用 σ_1、σ_2 为长、短轴做成的椭圆是所有椭圆中离矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应的超椭圆“距离”最近的；如果使用 σ_1、σ_2、σ_3 为轴作成椭球体，则得到所有椭球体中离矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应的超椭圆“距离”最近的椭球体……按这种方式，第 r 步之后，就得到了 $\boldsymbol{A}$ 的全部信息. 但即使执行到了第 r 步，我们也只利用了 $r+nr+nr=(2n+1)r$ 个数据，即矩阵的奇异值和对应的左右奇异向量. 这种思想可应用于图像压缩和泛函分析等不同的领域之中.

例 5.3.4　（**基于 SVD 的图像压缩**）如图 5-6 所示，对于一幅用 $m\times n$ 阶的像素矩阵 $\boldsymbol{A}$ 表示的图像（如人造卫星的大部分图片为 512×512 像素，包含 262144 个数据），如果传送所有 mn 个数据，显然数据量太大. 因此我们希望在传输之前，对数据进行压缩，这样就可以传送少一些的数据，当然在接收端必须能够重构原图像. 如果我们从矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 中选择 k 个奇异三元组 $(\sigma_i,\boldsymbol{u}_i,\boldsymbol{v}_i)$（$i=1,2,\cdots,k$）来逼近原图像，即用 $(m+n+1)k$ 个数据代替像素矩阵 $\boldsymbol{A}$. 那么在接收端，可得 $\boldsymbol{A}_k=\sum_{i=1}^{k}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$. 由于 $\boldsymbol{A}_k\approx\boldsymbol{A}$，从而在接收端可近似地重构出原图像. 此时，图像的压缩比为 $\rho=\dfrac{mn}{(m+n+1)k}$，其倒数称为图像

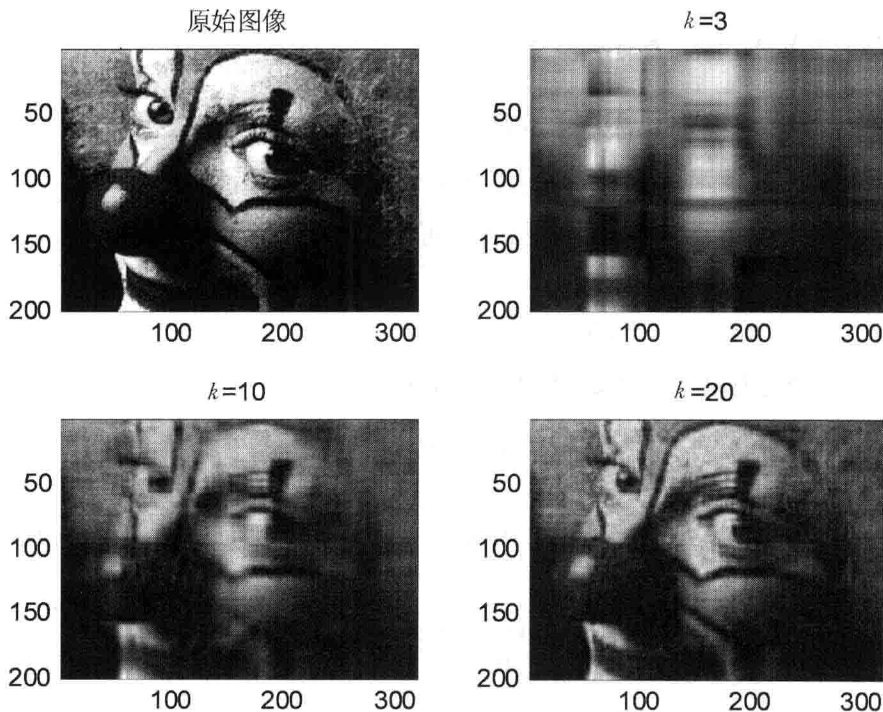


图 5-6　SVD 图像压缩效果图

的压缩率. 显然,实际使用时可根据不同的需要选择适当的 k 值. 比如图 5.6 是 Matlab 内置的小丑图形(顺便说一句,Matlab 中隐藏了很多图形),利用下列代码:

```
load clown.mat; %clown 是内置的 200 * 320 像素的图像
[U,S,V]= svd(X);colormap('gray'); k= 3;
X1= U(:,1:k)* S(1:k,1:k)* V(:,1:k)';image(X1)
```

已经能够抽取到"小丑"的主要特征,比如鼻子(图 5.6(b)). 当 $k=20$ 时,已基本能够重构原来的图像,此时传送数据 $(200+320+1)\times 20=10420$ 个,压缩率约为 0.1628, 非常之低.

当然,要特别说明的是,上面这种图像压缩技术并不是一种特别有效的技术. 事实上,莫勒指出,他的研究计算机图像处理的朋友将这种方法俏皮地称为 image degradration(图像退化).

既然讲到特征抽取,我们不能不指出,PCA 也可用于图像压缩. 具体算法大致如下:先使用 PCA 方法处理一个图像序列,提取其中的主元. 然后根据主元的排序去除其中次要的分量,再变换回原空间,则图像序列因为维数降低会得到很大的压缩. 这种压缩算法仍然是有损的压缩方法,但同时它又保持了其中最"重要"的信息.

我们不能不对 SVD 与 PCA 做些比较. 事实上,两者都依赖于正交分解. 在 SVD 方法中用以求解特征值问题的矩阵是 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$, 而在 PCA 中则是相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$. 由于 $\boldsymbol{R}_x$ 通常无法确定,因此通常用样本矩阵构造出它的近似 $\frac{1}{n}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$. 显然, $\lim\limits_{n\to\infty}\frac{1}{n}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{R}_x$. 这说明 SVD 与 PCA 间存在渐进关系.

在 SVD 的基础上,我们可以构造 Ky Fan 范数.

例 5.3.5　(**Ky Fan 范数**)设矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ 的 SVD 为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$, 且 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值为

$$\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_n\geqslant 0$$

对任意 $1\leqslant k\leqslant n$, 令

$$\varphi_k(\boldsymbol{A})=\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_k \tag{5.3.19}$$

则 $\varphi_k(\boldsymbol{A})$ 是 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的矩阵范数,称为 **Ky Fan k 范数**,记为 $\|\boldsymbol{A}\|_{(k)}$.

证明:略.

显然, $k=1$ 时的 $\|\boldsymbol{A}\|_{(1)}$ 就是谱范数 $\|\boldsymbol{A}\|_2$, $k=n$ 时的 $\|\boldsymbol{A}\|_{(n)}=\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{\frac{1}{2}}$ 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**迹范数**(trace norm)或**核范数**(nuclear norm).

定理 5.3.6　(**Ky Fan 优势定理**)设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{F}^{n\times n}$. 若 $\|\boldsymbol{A}\|_{(k)}\leqslant\|\boldsymbol{B}\|_{(k)}$ 对 $k=1,2,\cdots,n$ 都成立,则对任意酉不变范数 $\|\cdot\|$, 有

$$\|\boldsymbol{A}\|\leqslant\|\boldsymbol{B}\| \tag{5.3.20}$$

证明:略.

5.3.4　只要醒着,你就必须思考数学

Ky Fan 何许人也? 他就是与华罗庚、陈省身齐名的美籍华人数学家樊𰋀(见图 5-7). 他一生发表学术论文 140 篇,篇篇都是精品,被引用多达 4 千余次. 他的学术研究非常宽泛,

在拓扑群、非线性分析、不动点理论、凸分析、对策论、线性算子理论、逼近论及矩阵论等方面，他的创造已成为这些分支的经典与基石. 例如德布鲁(Gerard Debreu，1927—2004)运用 Ky Fan 不等式，就推导出一系列定理，并因此获得 1983 年的诺贝尔经济学奖.

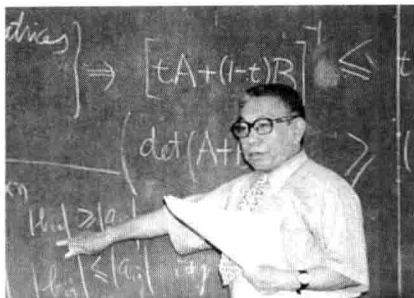


图 5-7　樊𰵺(1914—2010)

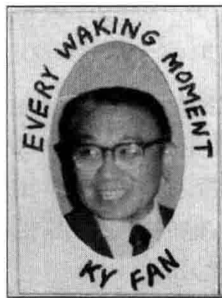


图 5-8　樊𰵺学生设计的 T 恤衫

樊先生 1932 年考入北京大学数学系，7 年后通过庚款留学选拔考试，赴法国巴黎大学，师从大数学家弗雷歇(Maurice René Fréchet，1878—1973，创立抽象空间理论，被视为泛函分析的创始人)攻读抽象分析，并于 1941 年获得法国国家博士学位. 之后，樊先生还与弗雷歇合著了法文版的《组合拓扑学引论》一书，影响很大.

令人非常同情的是，在樊先生留法期间，尚在国内的三个幼子突染急病，因重庆战时缺医少药，无法救治，相继夭折. 樊父闻讯后，也突发脑溢血撒手人寰. 痛失三子，成为樊先生永远无法疗愈的伤痛. 战后樊先生转赴美国，受到大数学家外尔和冯·诺依曼等人的影响，成为无穷维空间的开路先锋和终身领袖. 1965 年，圣塔芭芭拉加州大学(UCSB)特聘他为该校的数学教授.

1985 年暑假，UCSB 特意为他举办退休纪念活动，这是美国数学界当年的一大盛事. 在活动首日的晚宴上，一位创业于硅谷的学生的“表演”令人难忘. 只见此人西装革履登台，随讲随脱，脱到上身只穿一件 T 恤衫时，宾主哄堂大笑，因为衣服上印着一行字：EVERY WAKING MOMENT(见图 5-8). 原来樊先生每当新学期开学之初必会召集全系研究生开会“训话”，“训词”中常说的就是“你们现在已经是职业数学家了，只要醒着(Every Waking Moment)，你就必须思考数学！” 这已经成为 UCSB 数学系师生的座右铭，代代相传.

1989 年，久离故国的樊先生终于回到他已睽违五十载的古都北京，应邀回国讲学，并把他半个世纪的藏书全部捐献给了北京大学. 1999 年，他又捐赠美国数学会百万美元，设立“樊氏基金会”，旨在促进与资助中国数学家与世界数学家的交流.

“只要醒着，你就必须思考数学.”如今先生仙逝了，还醒着的我们，是不是应该承其遗愿，多多地思考数学问题呢？

习　题　五

5.1　设 $x=(i,-2,3+4i,0)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，求 $\|x\|_1$，$\|x\|_2$ 和 $\|x\|_\infty$.

5.2　设 f 是赋范线性空间 V 上的向量范数，证明：对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，有

$$|f(\boldsymbol{\alpha})-f(\boldsymbol{\beta})|\leqslant|\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\beta}|$$

5.3　设 $k_1,k_2>0$ 且 f,g 都是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数，则 $F=\max(f,g)$ 和 $G=k_1f+k_2g$ 都是 $\mathbb{C}^n$ 上的向量范数.

5.4　给出 $\mathbb{C}^n$ 中分别满足等式 $|x^{\mathrm{H}}y|=\|x\|_1\cdot\|y\|_\infty$ 和 $|x^{\mathrm{H}}y|=\|x\|_2\cdot\|y\|_2$ 的向量 x,y.

5.5　用图形描绘出 $\mathbb{R}^3$ 中的 1 范数单位球、2 范数单位球和 ∞范数单位球.

5.6　对任意 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{C}^n$，证明下列不等式，并指出何时等号成立.

(1) $\dfrac{1}{n}\|x\|_1\leqslant\|x\|_\infty\leqslant\|x\|_2\leqslant\|x\|_1$；

(2) $\dfrac{1}{\sqrt{n}}\|x\|_1\leqslant\|x\|_2\leqslant\sqrt{n}\|x\|_\infty$；

(3) $\|x\|_2\leqslant\sqrt{\|x\|_1\|x\|_\infty}$.

5.7　对任意 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，判断 $f(A)=m\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}|$ 是否为 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵范数.

5.8　对任意 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，证明 $f(A)=\|A\|_F+2\|A\|_2$ 是 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的矩阵范数.

5.9　已知 $A=\begin{pmatrix}-1&-1&4\\1&1&2\\1&-2&2\end{pmatrix}$，求 $\|A\|_{m_1}$，$\|A\|_F$，$\|A\|_{m_\infty}$，$\|A\|_1$，$\|A\|_2$ 及 $\|A\|_\infty$.

5.10　对任意 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，设 $\det(A)\neq0$ 且 λ 为 A 的任意特征值，则对 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中任意诱导范数 $\|A\|$，有

(1) $\|A^{-1}\|^{-1}\leqslant|\lambda|\leqslant\|A\|$；(2) $\|A^{-1}\|^{-1}=\min\limits_{x\neq0}\dfrac{\|Ax\|}{\|x\|}$.

5.11　设 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，则对 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中任意诱导范数 $\|A\|$，有 $\|A\|\geqslant|a_{ij}|$.

5.12　设 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，设 $\det(A)\neq0$，证明：$\|A^{-1}\|_p^{-1}\cdot\|A\|_p\geqslant1$.

5.13　证明酉矩阵的 2 范数等于 1.

5.14　证明：排列矩阵的 p 范数等于 1，对角矩阵的 p 范数是其对角元的最大模.

5.15　证明：$\|A^{\mathrm{H}}\|_\infty=\|A\|_1$.

5.16　对任意 $A=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，设 $r=r(A)$. 证明下列不等式：

(1) $\|A\|_2\leqslant\|A\|_F\leqslant\sqrt{r}\|A\|_2$；　(2) $\dfrac{1}{n}\|A\|_\infty\leqslant\|A\|_1\leqslant m\|A\|_\infty$；

(3) $\dfrac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_F\leqslant\|A\|_1\leqslant\sqrt{m}\|A\|_F$；(4) $\dfrac{1}{\sqrt{m}}\|A\|_F\leqslant\|A\|_\infty\leqslant\sqrt{n}\|A\|_F$；

(5) $\dfrac{1}{\sqrt{m}}\|A\|_\infty\leqslant\|A\|_2\leqslant\sqrt{n}\|A\|_\infty$；(6) $\dfrac{1}{\sqrt{n}}\|A\|_2\leqslant\|A\|_1\leqslant\sqrt{m}\|A\|_2$.

5.17　设 $A\in\mathbb{F}^{n\times n}$，则对 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中任意诱导范数 $\|A\|$，有 $\|A^k\|\leqslant\|A\|^k$，$k\in\mathbb{Z}$.

5.18　(1)证明：$\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的 m_∞ 范数与 $\mathbb{F}^n$ 上的 ∞范数是相容的；

(2)证明：$\mathbb{F}^{m\times n}$ 上的 m_1 范数与 $\mathbb{F}^n$ 上的 1 范数是相容的.

5.19 对任意 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{m\times n}$，设

$$f(\boldsymbol{A})=\sqrt{mn}\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant m,1\leqslant j\leqslant n}|a_{ij}|,\ g(\boldsymbol{A})=\max(m,n)\cdot\max_{1\leqslant i\leqslant m,1\leqslant j\leqslant n}|a_{ij}|$$

(1)证明：f 和 g 都是 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵范数；

(2)证明：f 与向量的 2 范数相容；

(3)证明：g 与向量的 2 范数和 ∞范数都是相容的.

5.20 证明：任意算子范数与 ∞范数等价，即对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ 和算子范数 $\|\boldsymbol{A}\|$，都存在正数 c_1,c_2，使得

$$c_1\|\boldsymbol{A}\|_\infty\leqslant\|\boldsymbol{A}\|\leqslant c_2\|\boldsymbol{A}\|_\infty$$

5.21 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$，证明：$\rho(\boldsymbol{A})$ 不是 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的矩阵范数.

5.22 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$，证明：$\|\boldsymbol{A}\|_2^2\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_1\cdot\|\boldsymbol{A}\|_\infty,\ k\in\mathbb{Z}$.

5.23 对半酉矩阵 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}$. 证明：$\|\boldsymbol{UAV}\|_2=\|\boldsymbol{A}\|_2$ 及 $\|\boldsymbol{UAV}\|_F=\|\boldsymbol{A}\|_F$.

5.24 **(外积的范数)**对任意 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^m,\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$，证明：

(1)$\|\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}}\|_2=\|\boldsymbol{x}\|_2\|\boldsymbol{y}\|_2$；

(2)$\|\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}}\|_\infty=\|\boldsymbol{x}\|_\infty\|\boldsymbol{y}\|_1$.

5.25 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{F}^{n\times n}$，证明：矩阵的 F 范数和 2 范数是相容的，即

$$\|\boldsymbol{AB}\|_F\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_F\|\boldsymbol{B}\|_2,\ \|\boldsymbol{AB}\|_F\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{B}\|_F$$

5.26 **(矩阵的正规偏离度)**对任意 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，设 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值.

(1)证明：$\sum\limits_{i=1}^n|\lambda_i|^2\leqslant\sum\limits_{i=1}^n\sum\limits_{j=1}^n|a_{ij}|^2$，等号成立当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵；

(2)解释度量 $\Delta_F\boldsymbol{A}=\sqrt{\sum\limits_{i=1}^n\sum\limits_{j=1}^n|a_{ij}|^2-\sum\limits_{i=1}^n|\lambda_i|^2}$ 的作用.

5.27 证明 $\kappa(\boldsymbol{A})=\dfrac{\max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\|}{\min\limits_{\|\boldsymbol{x}\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\|}$. 特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵时，$\kappa_2(\boldsymbol{A})=\dfrac{\max\limits_{\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})}|\lambda|}{\min\limits_{\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})}|\lambda|}=\dfrac{\sigma_1}{\sigma_n}$，这里 σ_1 和 σ_n 分别是 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值和最小奇异值.

5.28 证明：(1) $\dfrac{1}{n}\leqslant\dfrac{\kappa_\infty(\boldsymbol{A})}{\kappa_2(\boldsymbol{A})}\leqslant n$；(2) $\dfrac{1}{n}\leqslant\dfrac{\kappa_1(\boldsymbol{A})}{\kappa_2(\boldsymbol{A})}\leqslant n$.

5.29 **(几乎奇异矩阵未必是病态矩阵)**

(1)证明：对任意矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{F}^{n\times n}$，$\|\boldsymbol{A}\|_2\leqslant n\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}|$；

(2)对矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\varepsilon&\varepsilon\\0&\varepsilon\end{pmatrix}$，$0<\varepsilon\ll1$，利用(1)的结论估计 $\kappa_2(\boldsymbol{A})$.

第6章 矩阵分析及其应用

虽然在微积分的开端时期，无穷小被神学家嘲讽为“上帝的幽灵”，并引发了“第二次数学危机”，直到“实数理论”的出现，这场危机才算彻底解决. 但微积分自诞生起在近代社会所起的巨大作用，我们早已深有体会. 将微积分中的极限、导数、积分、级数、方程等分析学的思想和方法与矩阵相结合，如此“强强联合”，将更是威力无比. 在范数理论中，我们就已初步见识到这种威力. 事实上，矩阵分析论、空间与变换以及矩阵分解论是矩阵理论中的三大基础知识板块.

6.1 矩阵序列与矩阵级数

微积分的基础是实数理论，但就一般读者的学习经验而言，则是数列极限的收敛理论及其衍生的级数理论. 这方面的知识读者可参考文献[44]. 当我们将矩阵看成一个“超数”时，类比可得矩阵序列与矩阵级数. 问题是我们需要度量两个“超数”之间的接近程度，这样的度量工具就是前面的范数. 尽管使用坐标也可以描述两个矩阵的接近程度，但使用范数记号，明显简洁明晰，而且非常有助于思维和证明.

6.1.1 矩阵序列

定义 6.1.1 设有 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的**矩阵序列**（matrix sequence）

$$\{\boldsymbol{A}_k\} = \boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2, \boldsymbol{A}_3, \cdots, \boldsymbol{A}_k, \cdots$$

这里 $\boldsymbol{A}_k = (a_{ij}^{(k)})_{m\times n}$. 如果每个数列 $\{a_{ij}^{(k)}\}$ 都收敛，即有

$$\lim_{k\to+\infty} a_{ij}^{(k)} = a_{ij} \quad (i = 1,2,\cdots,m; j = 1,2,\cdots,n)$$

则称矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ **收敛于极限**(convergent to limit) $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m\times n}$，记为 $\lim\limits_{k\to+\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A}$. 否则就称矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 是**发散的**(divergent).

类比微积分中的数列极限和函数极限的性质，根据定义 6.1.1，可证明下列性质.

定理 6.1.1(线性运算) 设 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$，$\{\boldsymbol{B}_k\}$ 分别收敛于 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{F}^{m\times n}$，则对任意 $\lambda\in\mathbb{F}$，矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\pm\boldsymbol{B}_k\}$，$\{\lambda\boldsymbol{A}_k\}$ 分别收敛于 $\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B}$，$\lambda\boldsymbol{A}$，即

$$\lim_{k\to+\infty}(\boldsymbol{A}_k\pm\boldsymbol{B}_k) = \boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B}, \lim_{k\to+\infty}(\lambda\boldsymbol{A}_k) = \lambda\boldsymbol{A}$$

定理 6.1.2(乘法运算) 设 $\mathbb{F}^{m\times p}$ 中的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{m\times p}$，$\mathbb{F}^{p\times n}$ 中的矩阵

序列 $\{\boldsymbol{B}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{F}^{p\times n}$，则矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{B}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{AB}$，即 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{B}_k=\boldsymbol{AB}$.

推论 6.1.1 设 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{m\times n}$，则对任意常数矩阵 $\boldsymbol{P}\in\mathbb{F}^{p\times m}$ 和 $\boldsymbol{Q}\in\mathbb{F}^{n\times q}$，恒有

$$\lim_{k\to+\infty}(\boldsymbol{PA}_k\boldsymbol{Q})=\boldsymbol{PAQ}$$

定理 6.1.3 （**逆运算**）设 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$，且 $\boldsymbol{A}$ 和所有的 $\boldsymbol{A}_k$ 都可逆，则

$$\lim_{k\to+\infty}(\boldsymbol{A}_k)^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}$$

特别要注意在定理 6.1.3 中，条件"$\boldsymbol{A}$ 可逆"必不可少. 例如矩阵序列

$$\{\boldsymbol{A}_k\}=\left\{\begin{pmatrix}1+k^{-1} & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\right\}$$

虽然 $\boldsymbol{A}_k$ 都可逆且 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}$，但显然矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不可逆.

Matlab 中提供了内置函数 limit 可用于计算矩阵序列的极限，调用格式为

```
syms k; A= limit(Ak,k,inf)      % 声明符号变量 k,再调用符号计算函数 limit
```

其中，矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 必须给出每个元素的通项公式.

在微积分中，数列 $\{a_n\}$ 收敛于 a 即 $\lim\limits_{n\to\infty}a_k=a$ 可改写为 $\lim\limits_{n\to\infty}(a_k-a)=0$，也就是 $\lim\limits_{n\to\infty}|a_k-a|=0$. 这个想法可类比到矩阵序列，只要将其中的绝对值一般化为矩阵范数.

定理 6.1.4 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{m\times n}$ 的充要条件是对任意一种矩阵范数 $\|\cdot\|$，都有 $\lim\limits_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|=0$.

特别地，若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$，则 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{O}$ 的充要条件是 $\lim\limits_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k\|=0$.

证明：设 $\boldsymbol{A}_k=(a_{ij}^{(k)})_{m\times n}$，$\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{m\times n}$ $(i=1,\cdots,m;j=1,\cdots,n)$，则

$$\lim_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}a_{ij}^{(k)}=a_{ij}\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}(a_{ij}^{(k)}-a_{ij})=0$$

$$\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}^{(k)}-a_{ij}|^2}=0\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|_F=0$$

由范数的等价性可知，对于 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 上任意一种矩阵范数 $\|\cdot\|$，必存在正常数 c_1、c_2，使

$$c_1\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|_F\leqslant\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|\leqslant c_2\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|_F$$

再由数列极限的三明治定理即夹逼定理，可得

$$\lim_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|_F=0\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|=0$$

所以 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}\Leftrightarrow\lim\limits_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|=0$. 证毕.

定义 6.1.2 设有 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 和矩阵 $\boldsymbol{A}$，如果对任意一种矩阵范数 $\|\cdot\|$，都有

$$\lim_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{A}\|=0$$

则称矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{A}$，记为 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}$. 否则称矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 是发散的.

显然，定义 6.1.1 与定义 6.1.2 是等价的，前者称为**依元素收敛**或**依坐标收敛**(pointwise convengence)，后者则称为**依范数收敛**(normal convengence). 前者从微观或元素的层面将矩阵看成"一堆数"，拘泥或纠缠于细枝末节；后者则从宏观的符号层面将矩阵看成一个"完全的抽象物"，即一个具有某些指定运算的数学对象或"算子". "术语或符号的引入，往往是为了理论的易于表达和解决问题. 特别是在数学中，只要细加分析，即可发现符号化给数学理论的表述和论证带来极大的方便."（怀特海）显然，范数这个"术语或符号"就具有这样的威力. 因此用矩阵的范数理论来研究矩阵序列的收敛性是矩阵分析中最常用、最简洁的方法. 当然，实际使用时，我们的思维可以根据问题的需要在这两个层面间灵活切换.

向量是特殊的矩阵，上述结论自然对向量也成立.

定理 6.1.5　$\mathbb{F}^n$ 中的向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 收敛于 x^* 的充要条件是对任意一种向量范数 $\|\cdot\|$，都有

$$\lim_{k\to+\infty}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|=0$$

下面我们来考察如何判断矩阵序列的敛散性. 我们仍然采用类比思维，从数列极限入手.

等比数列 $\{q^n\}$ 是最常见的一种数列，类似地，最常见的矩阵序列是方阵的幂构成的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}^k\}$，即 $\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}^k$. 联想到等比数列 $\{q^n\}$ 收敛于 0 的充要条件是 $|q|<1$，类似地，$\{\boldsymbol{A}^k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{O}$ 的充要条件似乎应该是 $\|\boldsymbol{A}\|<1$. 这个想法是否正确呢?

以 $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2)$ 来分析. 由于 $\boldsymbol{A}^k=\mathrm{diag}(\lambda_1^k,\lambda_2^k)$，因此 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{O}$ 等价于 $\lim\limits_{k\to+\infty}\lambda_1^k=\lim\limits_{k\to+\infty}\lambda_2^k=0$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_i $(i=1,2)$ 的模都小于 1，此即 $\rho(\boldsymbol{A})<1$. 充要条件居然不是 $\|\boldsymbol{A}\|<1$，而是计算更复杂的 $\rho(\boldsymbol{A})<1$，引入谱半径的意义至少在这里露出端倪.

定义 6.1.3　如果 $\lim\limits_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{O}$，即 $\{\boldsymbol{A}^k\}$ 收敛于零矩阵 $\boldsymbol{O}$，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是**收敛矩阵**(convergent matrix). 否则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**发散矩阵**(divergent matrix).

定理 6.1.5　$\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是收敛矩阵的充要条件是其谱半径小于 1，即 $\rho(\boldsymbol{A})<1$.

证明：设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$，这里 $\boldsymbol{J}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_1(\lambda_1),\boldsymbol{J}_2(\lambda_2),\cdots,\boldsymbol{J}_s(\lambda_S))$，则 $\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{PJ}^k\boldsymbol{P}^{-1}$，从而由推论 6.1.1 和式 (2.6.6) 可知

$$\lim_{k\to+\infty}\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{O}\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\boldsymbol{J}^k=\boldsymbol{O}\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}J_i{}^k(\lambda_i)=\boldsymbol{O}(i=1,2,\cdots,s)$$

$$\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\begin{pmatrix}\lambda_i^k & \boldsymbol{C}_k^1\lambda_i^{k-1} & \cdots & \boldsymbol{C}_k^{m_i}\lambda_i^{k-m_i+1}\\ & \lambda_i^k & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & \boldsymbol{C}_k^1\lambda_i^{k-1}\\ & & & \lambda_i^k\end{pmatrix}=\boldsymbol{O}\ \text{（其中 } l>k \text{ 时规定 } C_k^l=0\text{）}$$

$$\Leftrightarrow\lim_{k\to+\infty}\lambda_i^k=0\Leftrightarrow|\lambda_i|<1\Leftrightarrow\rho(\boldsymbol{A})=\max_i|\lambda_i|<1$$

证毕.

谱半径不易计算，但注意到谱半径不超过任何一种矩阵范数，因此实际中常用矩阵

范数来判断矩阵是否是收敛矩阵. 只有当很难找到这样的矩阵范数时，我们才计算出矩阵的所有特征值，进而得到谱半径.

定理 6.1.6 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是收敛矩阵的充分条件是存在一种矩阵范数 φ，使得 $\varphi(\boldsymbol{A})<1$.

证明: 由于 $\rho(\boldsymbol{A})\leqslant\varphi(\boldsymbol{A})$，而 $\varphi(\boldsymbol{A})<1$，因此 $\rho(\boldsymbol{A})<1$. 根据定理 6.1.5，结论成立. 证毕.

作为计算简易的代价，对于范数都不小于 1 的矩阵，使用范数无法判断其敛散性.

例 6.1.1 判断下列矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否为收敛矩阵，其中

$$(1)\ \boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0.3+0.4i & 1\\ 0 & -0.8\end{pmatrix};\ (2)\ \boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-1 & 1 & 0\\ -4 & 3 & 0\\ 1 & 0 & 2\end{pmatrix};\ (3)\ \boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0.6 & 0.2\\ 0.5 & 0.4\end{pmatrix}.$$

解: (1) $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $0.3+0.4i$ 和 -0.8，故 $\rho(\boldsymbol{A})=\max(0.5,0.8)=0.8<1$，由定理 6.1.5 可知 $\boldsymbol{A}$ 是收敛矩阵.

(2) 例 2.5.1 中已算出 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 2,1,1，所以 $\rho(\boldsymbol{A})=2>1$，$\boldsymbol{A}$ 是发散矩阵.

(3) 注意到虽然 $\|\boldsymbol{A}\|_1=1.1$，但是有 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty=0.9$，根据定理 6.1.6 可知 $\boldsymbol{A}$ 是收敛矩阵.

例 6.1.2 已知矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 2\\ 2 & 1 & 2\\ 2 & 2 & 1\end{pmatrix}$，令 $\boldsymbol{B}=\dfrac{1}{\rho(A)}\boldsymbol{A}$，求 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k$.

解: $\boldsymbol{A}$ 是对称矩阵，计算可知 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P\Lambda P}^{-1}$，其中

$$\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(5,-1,-1),\ \boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1 & -1 & -1\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

显然 $\rho(\boldsymbol{A})=5$，并且 $B=\dfrac{1}{\rho(\boldsymbol{A})}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PDP}^{-1}$，其中 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(1,-0.2,-0.2)$，因此 $\boldsymbol{D}^k=\mathrm{diag}[1,(-0.2)^k,(-0.2)^k]$，从而

$$\begin{aligned}\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k&=\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{PD}^k\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}(\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{D}^k)\boldsymbol{P}^{-1}\\&=\begin{pmatrix}1 & -1 & -1\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & & \\ & 0 & \\ & & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1 & -1\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}\\&=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ -1 & 2 & -1\\ -1 & -1 & 2\end{pmatrix}\\&=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

本题使用 Matlab 来计算的代码如下：

```
syms k;A= [1 2 2;2 1 2;2 2 1];[P,D]= eig(A);
r= vrho(A); D= D/r;  %计算谱半径 r,并将 D 更新为 B 的谱分解的对角矩阵
Dk= D^k  %进行符号计算时只有对角矩阵可使用幂运算符^
LB= P* limit(Dk,k,inf)* P^(- 1)
```

当 $|q|<1$ 时，公比 $|q|=\frac{|q^{n+1}|}{|q^n|}$ 刻画了等比数列 $\{q^n\}$ 收敛于 0 的收敛速率，类似地，对收敛矩阵 $\boldsymbol{A}$，其幂 $\boldsymbol{A}^k$ 收敛于 $\boldsymbol{O}$ 的**收敛速率**(convergence rate) r 可以通过 $r=\lim\limits_{k\to\infty}\frac{\|\boldsymbol{A}^{k+1}\|}{\|\boldsymbol{A}^k\|}$ (为什么不是谱半径?)来加以刻画. 下面我们给出刻划这种渐近行为的一个基本结论.

定理 6.1.7　设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ 且 $\varepsilon>0$. 则对任意矩阵范数 $\|\cdot\|$，存在正数 c_1 (依赖于所用范数)和 $c_2=c_2(\boldsymbol{A},\varepsilon)$ (依赖于使用的范数,矩阵 $\boldsymbol{A}$ 及 ε)，使得

$$c_1\rho(\boldsymbol{A})^k\leqslant\|\boldsymbol{A}^k\|\leqslant c_2(\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon)^k \tag{6.1.1}$$

证明: 设 (λ,x) 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的优势特征对且 $\|\boldsymbol{x}\|_2=1$，则

$$\|\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}\|_2=\|\lambda^k\boldsymbol{x}\|_2=|\lambda|^k=\rho(\boldsymbol{A})^k$$

因此 $\|\boldsymbol{A}^k\|_2=\max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|_2=1}\|\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}\|_2\geqslant\rho(\boldsymbol{A})^k$ 根据矩阵范数的相容性，存在常数 $c_1>0$，使得

$$\|\boldsymbol{A}^k\|\geqslant c\|\boldsymbol{A}^k\|_2\geqslant c\rho(\boldsymbol{A})^k$$

另外，令 $\varphi(\boldsymbol{A})$ 为某种相容矩阵范数，且 $\varphi(\boldsymbol{A})\leqslant\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon$，则由习题 5.17 可知

$$\varphi(\boldsymbol{A}^k)\leqslant\varphi(\boldsymbol{A})^k\leqslant(\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon)^k$$

同样，根据范数相容性可知，存在常数 $c_2=c_2(\boldsymbol{A},\varepsilon)>0$，使得

$$\|\boldsymbol{A}^k\|\leqslant c_2\varphi(\boldsymbol{A}^k)\leqslant c_2(\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon)^k$$

证毕.

显然定理 6.1.7 指出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的幂 $\boldsymbol{A}^k$ 本质上是以 $\rho(\boldsymbol{A})^k$ 的规模增大或收缩的. 以矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{J}_2(0.5)$ 为例，其谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})=\frac{1}{2}$，显然 $\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{J}_2(0.5)^k=\begin{pmatrix}2^{-k} & k\cdot 2^{-k+1}\\ 0 & 2^{-k}\end{pmatrix}$，故

$$\|\boldsymbol{A}^k\|_\infty=2^{-k}(1+2k)$$

$$\frac{\|\boldsymbol{A}^{k+1}\|}{\|\boldsymbol{A}^k\|}=\frac{3+2k}{2(1+2k)}=\frac{1}{2}+\frac{1}{1+2k}$$

$$r=\lim_{k\to\infty}\frac{\|\boldsymbol{A}^{k+1}\|}{\|\boldsymbol{A}^k\|}=\frac{1}{2}$$

即 $\rho(\boldsymbol{A})\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}^{k+1}\|}{\|\boldsymbol{A}^k\|}\leqslant\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon$ 且 $r=\rho(\boldsymbol{A})$. 这个不等式之所以如此简单，是因为此时的优势特征值 $\lambda=0.5$ 是亏损特征值. 经过 10 次迭代，收敛速率 r 从 $k=1$ 时的 $\frac{5}{6}$ 迅速降到

$k=10$ 时的 $\frac{23}{42}$，已经非常接近 $\rho(\boldsymbol{A})$，误差不到 0.05. 因此收敛速率本质上是渐近地接近谱半径的.

6.1.2 矩阵级数

我们知道，数列 $\{a_n\}$ 的所有项的和构成级数 $\sum_{n=1}^{\infty} a_n$，由此衍生出的级数理论是微积分的基础理论，其中的许多概念和结论大都能推广到矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$.

定义 6.1.4 设有 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$，则称

$$\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_2 + \cdots + \boldsymbol{A}_k + \cdots$$

为**矩阵级数**(matrix series). 如果 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$ 的部分和序列 $\{\boldsymbol{S}_k\}$ 收敛于矩阵 $\boldsymbol{S}$，这里

$$\boldsymbol{S}_k = \boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_2 + \cdots + \boldsymbol{A}_k$$

则称矩阵级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$ 收敛于 $\boldsymbol{S}$，或 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$ 的**和**(sum)为 $\boldsymbol{S}$，记为 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{S}$.

显然，矩阵级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$ 收敛于 $\boldsymbol{S}$ 时，矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 收敛于 $\boldsymbol{O}$，即 $\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{O}$. 这是因为 $k\to\infty$ 时 $\boldsymbol{A}_k = S_k - \boldsymbol{S}_{k-1} \to \boldsymbol{S} - \boldsymbol{S} = \boldsymbol{O}$. 这个结果显然与数项级数中的情形完全一致.

由定义 6.1.4 可以推出下列性质：

(1) 设 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$，$\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{B}_k$ 分别收敛于 $\boldsymbol{S}, \boldsymbol{T} \in \mathbb{F}^{m\times n}$，则对任意 $\lambda \in \mathbb{F}$，有

$$\sum_{k=1}^{\infty} (\boldsymbol{A}_k \pm \boldsymbol{B}_k) = \boldsymbol{S} \pm \boldsymbol{T}, \quad \sum_{k=1}^{\infty} \lambda \boldsymbol{A}_k = \lambda \boldsymbol{S}$$

(2) 设 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{S} \in \mathbb{F}^{m\times n}$，则对任意常矩阵 $\boldsymbol{P} \in \mathbb{F}^{p\times m}$ 和 $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{F}^{n\times q}$，有 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{P}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{S}\boldsymbol{Q}$.

证明： 仅给出(2)的证明，其他类似.

利用定义 6.1.4 和推论 6.1.1 可知

$$\lim_{k\to\infty} \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{P}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{Q} = \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{P}\left(\sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{A}_i\right)\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}\left(\lim_{k\to\infty} \sum_{i=1}^{k} \boldsymbol{A}_i\right)\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{S}\boldsymbol{Q}$$

因此 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{P}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{S}\boldsymbol{Q}$. 证毕.

由定义 6.1.4 还可推出矩阵级数在矩阵与元素两层面间的转换关系，即 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \boldsymbol{A}_k$ 收敛于 $\boldsymbol{S}$ 的充要条件是所有 mn 个数项级数 $\sum_{k=1}^{\infty} a_{ij}^{(k)}$ 都收敛于相应的 $\boldsymbol{S}_{ij}$，其中

$$\boldsymbol{A}_k = (a_{ij}^{(k)}), \quad \boldsymbol{S} = (\boldsymbol{S}_{ij}) \quad (i = 1,2,\cdots,m; j = 1,2,\cdots,n)$$

例 6.1.3　已知 $A_k=\begin{pmatrix}\frac{1}{2^{k-1}} & \frac{3\pi}{4^k}\\ 0 & \frac{1}{k(k+1)}\end{pmatrix}$，求 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$ 的和.

解: 显然从元素层面入手较简单，即

$$\sum_{k=1}^{\infty}A_k=\begin{pmatrix}\sum\limits_{k=1}^{\infty}\frac{1}{2^{k-1}} & \sum\limits_{k=1}^{\infty}\frac{3\pi}{4^k}\\ 0 & \sum\limits_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k(k+1)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2 & \pi\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

从元素层面，也可以将数项级数的绝对收敛推广到矩阵级数.

定义 6.1.5　对于 $\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$，这里 $A_k=(a_{ij}^{(k)})$ $(i=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,n)$. 如果所有 mn 个数项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}a_{ij}^{(k)}$ 都绝对收敛，则称矩阵级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$ **绝对收敛**(absolutely convergent).

在微积分中，数项级数敛散性的判定大都转化为判定正项级数的敛散性，与之类似，判定矩阵级数是否绝对收敛也可借助范数理论转化为判定正项级数的敛散性.

定理 6.1.8　$\mathbb{F}^{m\times n}$ 中的矩阵级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$ 绝对收敛的充要条件是是正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\|A_k\|$ 收敛，这里的矩阵范数是任意的.

证明: 必要性. 若矩阵级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$ 绝对收敛，这里 $A_k=(a_{ij}^{(k)})\in\mathbb{F}^{m\times n}$ $(i=1,\cdots,m;j=1,\cdots,n)$，则正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}|a_{ij}^{(k)}|$ 都收敛，收敛必有界，故存在 M_{ij}，使得 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}|a_{ij}^{(k)}|<M_{ij}$，从而

$$\sum_{k=1}^{\infty}\|A_k\|_{m_1}=\sum_{k=1}^{\infty}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}^{(k)}|\right)<mnM$$

其中，$M=\max\limits_{i,j}M_{ij}$. 所以正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\|A_k\|_{m_1}$ 收敛. 由矩阵范数的等价性可知，对任意矩阵范数，正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\|A_k\|$ 都收敛.

充分性. 若对任意矩阵范数，正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\|A_k\|$ 都收敛，则正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\|A_k\|_{m_1}$ 也收敛，故 $|a_{ij}^{(k)}|\leqslant\sum\limits_{i=1}^{m}\sum\limits_{j=1}^{n}|a_{ij}^{(k)}|=\|A_k\|_{m_1}$. 根据正项级数的比较判别法，"大敛则小敛"，所以正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}|a_{ij}^{(k)}|$ 也收敛，即正项级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}a_{ij}^{(k)}$ 绝对收敛，由定义可知，矩阵级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty}A_k$ 绝对收敛. 证毕.

微积分及复变函数的级数理论中，最重要的幂级数理论也可推广到矩阵.

思考:幂级数理论的重要性体现在何处?

定义 6.1.6 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的矩阵级数

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k = c_0\boldsymbol{I} + c_1\boldsymbol{A} + c_2\boldsymbol{A}^2 + \cdots + c_k\boldsymbol{A}^k + \cdots$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的幂级数,简称**矩阵幂级数**(matrix power series),这里 $c_k \in \mathbb{F}$.

注意:只有方阵才有矩阵幂级数.

复变量 z 的幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ 显然是实变量 x 的幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k x^k$ 的推广,即后者可视为前者的特殊情形. 判断敛散性时,两者常使用的都是收敛半径,而且前者的收敛圆与实轴的交集显然就是后者的收敛区间. 矩阵幂级数则是两者的进一步推广. 因此讨论矩阵幂级数的敛散性问题自然就与复变量的幂级数的敛散性问题联系起来,并且使用的工具也应该是与收敛半径对应的谱半径.

定理 6.1.9 设 $\mathbb{F}$上的幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ 的收敛半径为R,则对矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{F}^{n\times n}$ 的幂级数 $\sum\limits_{k=1}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$,当 $\rho(\boldsymbol{A}) < R$ 时 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$ 绝对收敛;当 $\rho(\boldsymbol{A}) > R$ 时 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$ 发散;当 $\rho(\boldsymbol{A}) = R$ 时这里无法判断.

证明:设 $\rho(\boldsymbol{A}) < R$, 则存在正数 $\varepsilon > 0$, 使得 $\rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon < R$. 由定理 5.3.2 可知,存在 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的相容矩阵范数 $\varphi(\boldsymbol{A})$, 使得 $\varphi(\boldsymbol{A}) \leqslant \rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon < R$, 于是

$$0 \leqslant \varphi(c_k\boldsymbol{A}^k) \leqslant |c_k|\varphi(\boldsymbol{A}^k) \leqslant |c_k|\varphi(\boldsymbol{A})^k \leqslant |c_k|(\rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon)^k$$

因为 $\rho(\boldsymbol{A}) + \varepsilon \in (-R,R)$, 所以 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} |c_k|(\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon)^k$ 绝对收敛,绝对收敛必收敛,故 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} |c_k|(\rho(\boldsymbol{A})+\varepsilon)^k$ 也收敛,于是由"大敛则小敛"可知正项级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\varphi(c_k\boldsymbol{A}^k)$ 收敛,故 $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\varphi(c_k\boldsymbol{A}^k)$ 绝对收敛. 再由定理 6.1.8 可知 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$ 绝对收敛.

当 $\rho(\boldsymbol{A}) > R$ 时,设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$, 则必有某个特征值 λ_0 满足 $|\lambda_0| > R$.

设 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PJP}^{-1}$, 这里 $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & k_1 & & \\ & \lambda_2 & \ddots & \\ & & \ddots & k_{n-1} \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$, 其中 $k_1,\cdots,k_{n-1} = 0$ 或 1.

注意到 $\boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{PJ}^k\boldsymbol{P}^{-1}$, 因此 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k = \sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{PJ}^k\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}(\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{J}^k)\boldsymbol{P}^{-1}$. 因为 $\boldsymbol{J}^k$ 的对角元为 λ_i^k ($i = 1,2,\cdots,n$),故矩阵幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{J}^k$ 的对角元为 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\lambda_i^k$, 其中某个 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\lambda_0^k$ 是发散的,所以 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{J}^k$ 是发散的,从而可知 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$ 也发散. 证毕.

注意,当 $\rho(\boldsymbol{A}) = R$ 时, $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{A}^k$ 的敛散性不能用定理 6.1.9 来判定,但可以使用其他

方法.

推论 6.1.2　设 $\mathbb{F}$上的幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ 的收敛半径为 ∞，即 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ 处处绝对收敛，则对 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 中的任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，矩阵幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k$ 也"处处"绝对收敛.

例 6.1.4　判断下列矩阵幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k$ 的敛散性.

(1) $c_k = 1, \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0.3 & 0.5 \\ 0.6 & 0.4 \end{pmatrix}$;

(2) $c_k = \dfrac{1}{(k+1)^2}, \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$;

(3) $c_k = \dfrac{1}{k+1}, \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$.

解: (1) 级数 $\sum_{k=0}^{\infty} x^k$ 的收敛半径为 $R=1$，而 $\|\boldsymbol{A}\|_1 = 0.9 < R$，因此 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_1 < R$，故该级数收敛.

(2) $\sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{1}{(k+1)^2} x^k$ 的收敛半径为 $R=1$，但 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 1,1，即 $\rho(\boldsymbol{A}) = 1 = R$，不能使用定理 6.1.9. 注意到此时

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^2} \begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \begin{pmatrix} 1 & k-1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} & \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k-1}{k^2} \\ 0 & \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \end{pmatrix}$$

尽管 p 级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{1}{k^2}$ 收敛，但调和级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{1}{k}$ 却是发散的，因此 $\sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{k-1}{k^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{1}{k} - \sum_{k=1}^{\infty} \dfrac{1}{k^2}$ 发散，从而原级数也发散.

(3) $\sum_{k=0}^{\infty} \dfrac{1}{k+1} x^k$ 的收敛半径为 $R=1$，且 $\rho(\boldsymbol{A}) = 1 = R$，仍然不能使用定理 6.1.9. $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PJP}^{-1}$，其中 $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，因此

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k+1} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{P}\Big(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k+1} \boldsymbol{J}^k\Big)\boldsymbol{P}^{-1}$$

由于

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k+1} \boldsymbol{J}^k = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \boldsymbol{J}^{k-1} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^{k-1}$$

$$= \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} & \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \\ 0 & \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \end{pmatrix}$$

莱布尼兹级数 $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k}$ 收敛,但级数 $\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k$ 却发散,因此 $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k+1}\boldsymbol{J}^k$ 发散,从而原级数也发散.

最后讨论最特殊的矩阵幂级数,即 **Neumann 级数**

$$\sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^2 + \cdots + \boldsymbol{A}^k + \cdots$$

由于复变量幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$ 的收敛半径是 1,并且收敛于 $(1-z)^{-1}$. 与矩阵类比,并结合定理 6.1.5 和定理 6.1.9,可得下列结论.

定理 6.1.10 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的 Neumann 级数收敛于 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}$ 的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{A}) < 1$.

证明:充要性的证明留作练习. 这里只证 Neumann 级数收敛于 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}$.

设 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,则 $1-\lambda$ 为 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 的特征值,因为 $\rho(\boldsymbol{A}) < 1$, 所以 $|\lambda| \leqslant 1$, 此即 $1-\lambda \in (0,2)$, 因此矩阵 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 可逆,并且 $\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{O}$. 令 $\boldsymbol{S} = \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k$, $\boldsymbol{S}_m = \sum_{k=0}^{m-1} \boldsymbol{A}^k$, 则 $\boldsymbol{S}_m(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^m$, 从而 $\boldsymbol{S}_m = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \boldsymbol{A}^m(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}$, 两边令 $m\to\infty$即得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S} = \lim_{m\to\infty} \boldsymbol{S}_m &= (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \lim_{m\to\infty} \boldsymbol{A}^m (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \boldsymbol{O}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} \\ &= (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} \end{aligned}$$

证毕.

定理 6.1.11 设 $\|\cdot\|$ 为 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上满足 $\|\boldsymbol{I}\| = 1$ 的相容矩阵范数,如果对于矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{F}^{n\times n}$, 成立 $\|\boldsymbol{A}\| < 1$, 则有误差估计式

$$\left\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \sum_{k=0}^{m-1} \boldsymbol{A}^k\right\| \leqslant \frac{\|\boldsymbol{A}\|^m}{1-\|\boldsymbol{A}\|}$$

证明:由于 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|$, 由题知 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\| < 1$, 因此 Neumann 级数收敛,从而

$$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \sum_{k=0}^{m-1} \boldsymbol{A}^k = \sum_{k=m}^{\infty} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{A}^m \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{A}^m (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}$$

两边取范数,并利用定理 5.3.3 和矩阵范数的相容性,即得

$$\left\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} - \sum_{k=0}^{m-1} \boldsymbol{A}^k\right\| \leqslant \|\boldsymbol{A}^m\| \cdot \|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|^m \frac{1}{1-\|\boldsymbol{A}\|}$$

证毕.

例 6.1.5 判断下列矩阵幂级数收敛并求出其和.

(1) $\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k$, 其中 $c_k = 1$, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.3 \\ 0.7 & 0.6 \end{pmatrix}$; (2) $\sum_{k=1}^{\infty} c_k \boldsymbol{A}^k$, 其中 $c_k = k$, $\boldsymbol{A}$ 同(1).

解:(1)显然 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_1 = 0.9 < 1$，因此矩阵幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}^k$ 收敛，并且

$$\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}^k = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1} = \frac{10}{11}\begin{pmatrix}4 & 3\\ 7 & 8\end{pmatrix}$$

注意,可使用“两调一除公式” $\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}^{-1} = \dfrac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix}d & -b\\ -c & a\end{pmatrix}$ 来求二阶矩阵的逆矩阵.

(2)级数 $\sum_{k=1}^{\infty}kx^k$ 的收敛半径是 $R=1$，$\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_1 < R$，故 $\sum_{k=1}^{\infty}k\boldsymbol{A}^k$ 收敛.

由于 $\sum_{k=0}^{\infty}x^k = (1-x)^{-1}$，两边求导,得 $\sum_{k=1}^{\infty}kx^{k-1} = (1-x)^{-2}$，故

$$\sum_{k=1}^{\infty}kx^k = x\sum_{k=1}^{\infty}kx^{k-1} = x\,(1-x)^{-2}$$

从而 $\sum_{k=1}^{\infty}k\boldsymbol{A}^k = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-2} = \dfrac{10}{121}\begin{pmatrix}326 & 327\\ 763 & 762\end{pmatrix}$.

Matlab 提供了内置函数 symsum,可用于求级数的和以及部分和. 调用格式分别为

```
symsum(S),symsum(S,v),symsum(S,a,b),symsum(S,v,a,b),
```

其中,自变量 v 可由内置变量 symvar 缺省指定,b 可取整数或 inf,a、b 同时缺省时求和区间为[0,v−1]. 但当 S 是矩阵时,求和是按元素进行的,因此必须明确给出每个元素的通项公式.

卡尔·诺依曼(Carl Neumann,1832—1935)是非常容易被混淆为计算机之父冯·诺依曼的数学家. 他出生于以“七桥问题”闻名世界的哥尼斯堡,父亲弗朗茨·诺依曼(Franz Neumann,1798—1895)是哥尼斯堡大学的物理学教授. 1855 年获哥尼斯堡大学博士学位后,他辗转多地,最终于 1868 年任职于莱比锡大学,直至退休. 他的研究领域涉及数学物理、位势论、电动力学等应用数学领域. 以他的名字命名的 Neumann 级数,是他在 1877 年提出的,对研究有界算子的谱理论非常有帮助.

6.2　解线性方程组的古典迭代法

矩阵分解从乘法入手,把一个矩阵分解为几个特殊矩阵因子的乘积,而矩阵分裂则从加法入手,把一个矩阵分裂为几个特殊矩阵之和. 两者的手段都是将一般矩阵变成特殊矩阵. 在本节中,我们基于矩阵分裂技术,构造了三种古典迭代法.

6.2.1　三种基本迭代法

考虑线性方程组

$$\begin{cases} 4x_1 + x_2 & = & 5 \\ x_1 + 4x_2 + x_3 & = & 6 \\ \quad\quad x_2 + 4x_3 & = & 5 \end{cases} \tag{6.2.1}$$

显然精确解为 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}} = (1,1,1)^{\mathrm{T}}$. 为了构造形如式 (1.4.1) 的迭代格式，我们必须把变量 x_1, x_2, x_3 分别从三个方程中分离出来，也就是

$$\begin{cases} x_1 = -\dfrac{1}{4}x_2 + \dfrac{5}{4} \\ x_2 = -\dfrac{1}{4}x_1 - \dfrac{1}{4}x_3 + \dfrac{6}{4} \\ x_3 = -\dfrac{1}{4}x_2 + \dfrac{5}{4} \end{cases}$$

这样就可以构造出如下的迭代格式：

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & -\dfrac{1}{4}x_2^{(k)} & + \dfrac{5}{4} \\ x_2^{(k+1)} = -\dfrac{1}{4}x_1^{(k)} & -\dfrac{1}{4}x_3^{(k)} & + \dfrac{6}{4} \\ x_3^{(k+1)} = & -\dfrac{1}{4}x_2^{(k)} & + \dfrac{5}{4} \end{cases} \quad (k = 0,1,2,\cdots) \tag{6.2.2}$$

其中，$\boldsymbol{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})^{\mathrm{T}}$ 是任意给定的**初始向量**(initial vector). 这样在迭代格式 (6.2.2) 中，依次令 $k = 0,1,2,\cdots$，便得到一个向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$. 理论上，若存在 $\boldsymbol{x}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)^{\mathrm{T}}$ 满足 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$，则 $\boldsymbol{x}^*$ 就是原方程组的解. 这样通过迭代格式 (6.2.2) 逐步逼近 $\boldsymbol{x}^*$ 的过程就称为 **Jacobi 迭代**.

将上述过程一般化，考虑线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$，$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_n)^{\mathrm{T}}$，显然其与式 (6.2.2) 对应的迭代格式为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1,j\neq i}^{n}(-a_{ij}x_j^{(k)}) + \frac{1}{a_{ii}}b_i \quad (i = 1,2,\cdots,n) \tag{6.2.3}$$

也就是

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1,n-1}x_{n-1}^{(k)} - a_{1n}x_n^{(k)}) + \dfrac{1}{a_{11}}b_1 \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{22}}(-a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2,n-1}x_{n-1}^{(k)} - a_{2n}x_n^{(k)}) + \dfrac{1}{a_{22}}b_2 \\ \cdots\cdots \\ x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}(-a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - a_{n3}x_3^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}) + \dfrac{1}{a_{nn}}b_n \end{cases} \tag{6.2.4}$$

观察式 (6.2.4) 可知，我们可将矩阵 $\boldsymbol{A}$ **分裂**(matrix splitting)为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{U} \tag{6.2.5}$$

其中，

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn}),\ -\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},\ -\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

这样，式 (6.2.4) 就可写成如下的矩阵形式：

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{U} + \boldsymbol{L})\,\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{6.2.6}$$

又由式 (6.2.5) 可知 $\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}$，因此式 (6.2.6) 变形为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A})\,\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}b \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{6.2.7}$$

比照式 (1.4.1) 可知，在 Jacobi 迭代中，其迭代矩阵为 $\boldsymbol{B}_J = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}$，另外 $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$.

观察式 (6.2.4) 可知，在第一个方程中，一旦算出值 $x_1^{(k+1)}$，显然，马上可替换掉后续方程中的 $x_1^{(k)}$，以保证后续方程中执行每次计算时使用的都是最新的"信息"，而且还可能会加快收敛速度，这从直观上很容易理解；类似地，一旦算出 $x_2^{(k+1)}$，马上可替换掉后续方程中的 $x_2^{(k)}$，……，这种迭代过程就是 **Gauss-Seidel 迭代**. 此时式 (6.2.3) 变成了

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1}(-a_{ij}x_j^{(k+1)}) + \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n}(-a_{ij}x_j^{(k)}) + \frac{1}{a_{ii}}b_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{6.2.8}$$

也就是

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{11}}(-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1,n-1}x_{n-1}^{(k)} - a_{1n}x_n^{(k)}) + \dfrac{1}{a_{11}}b_1 \\ x_2^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{22}}(-a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2,n-1}x_{n-1}^{(k)} - a_{2n}x_n^{(k)}) + \dfrac{1}{a_{22}}b_2 \\ \cdots\cdots \\ x_n^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{nn}}(-a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - a_{n3}x_3^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}) + \dfrac{1}{a_{22}}b_n \end{cases} \tag{6.2.9}$$

同时，式 (6.2.6) 变成了 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$，注意到 $(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L})^{-1} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{D}$，故可得 Gauss-Seidel 迭代法的迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)} + (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{6.2.10}$$

显然，在 Gauss-Seidel 迭代中，其迭代矩阵为 $\boldsymbol{B}_{GS} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$，另外 $\boldsymbol{f} = (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$.

对方程组 (6.2.1)，取初始值为 $\boldsymbol{x}^{(0)} = (0, 0, 0)^{\mathrm{T}}$，分别采用上述两种方法，其迭代过

程如表 6-1 所示. 显然,两种方法都是收敛的,而且经过 7 次迭代,Jacobi 迭代法算出的 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 与精确解 $\boldsymbol{x}^*$ 的误差 $\|\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty$ 就已低于 10^{-3},而 Gauss-Seidel 迭代法达到这个目标则只用了 4 次迭代.

表 6-1 Jacobi 迭代法与 Gauss-Seidel 迭代法的迭代过程比较

k	J 法的 $\boldsymbol{x}^{(k)}$	$\|\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty$	GS 法的 $\boldsymbol{x}^{(k)}$	$\|\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty$
1	$(1.25,1.5,1.25)^{\mathrm{T}}$	0.5	$(1.25,1.1875,0.9531)^{\mathrm{T}}$	0.25
2	$(0.875,0.875,0.875)^{\mathrm{T}}$	0.125	$(0.9531,1.0234,0.9941)^{\mathrm{T}}$	0.0469
3	$(1.0313,1.0625,1.0313)^{\mathrm{T}}$	0.0625	$(0.9941,1.0029,0.9993)^{\mathrm{T}}$	0.0059
4	$(0.9844,0.9844,0.9844)^{\mathrm{T}}$	0.0156	$(0.9993,1.0004,0.9999)^{\mathrm{T}}$	$<10^{-3}$
5	$(1.0039,1.0078,1.0039)^{\mathrm{T}}$	0.0078		
6	$(0.9980,0.9980,0.9980)^{\mathrm{T}}$	0.0020		
7	$(1.0005,1.0010,1.0005)^{\mathrm{T}}$	$<10^{-3}$		

如前所述,直观上我们觉得 Gauss-Seidel 迭代应该优于 Jacobi 迭代,直觉作为合情推理的主要成分很值得培养,但千万别忘了直觉有时会欺骗我们. 例如用迭代法求解下面的线性方程组:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6.2.11}$$

仍取初始值为 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^{\mathrm{T}}$,使用 3 次 Jacobi 迭代,就得到精确解 $\boldsymbol{x}^*=(-3,3,1)^{\mathrm{T}}$,但 Gauss-Seidel 迭代却是发散的. 当然,我们不会"悲伤"和"心急","镇静"之后我们就会发现线索:使用最新信息肯定没错,既然现在有些问题,那新旧信息搭配一下又如何,这就是说,能否设计一种带参数的迭代格式,通过参数的调节,改善乃至加快迭代的收敛速度? 具体到上面的问题,在已求出 $x^{(k)}$ 的基础之上,仍然利用 Gauss-Seidel 迭代求出 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$,然后能否再利用旧的 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 与新的 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ 的线性组合,得到更好的近似解? 这种思想就是 **SOR**(successive over relaxation method)**迭代**,也称**超松弛迭代**,这里"松弛"的意思可理解成在参数的选择上,我们具有较大的灵活性.

按上述分析,SOR 迭代的迭代过程如下:

第一步,用 Gauss-Seidel 迭代求出辅助值 $\tilde{\boldsymbol{x}}^{(k+1)}=(\tilde{x}_1^{(k+1)},\tilde{x}_2^{(k+1)},\cdots,\tilde{x}_n^{(k+1)})^{\mathrm{T}}$,其中

$$\tilde{x}_i^{(k+1)}=\frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1}(-a_{ij}\tilde{x}_j^{(k+1)})+\frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n}(-a_{ij}x_j^{(k)})+\frac{1}{a_{ii}}b_i \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{6.2.12}$$

第二步,选取**松弛因子** ω,将 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{x}}^{(k+1)}$ 组合成待求的 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}=(x_1^{(k+1)},x_2^{(k+1)},\cdots,x_n^{(k+1)})^{\mathrm{T}}$,即

$$x_i^{(k+1)}=(1-\omega)x_i^{(k)}+\omega\tilde{x}_i^{(k+1)} \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

也就是

$$x_i^{(k+1)} = \omega\left[\frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=1}^{i-1}(-a_{ij}x_j^{(k+1)}) + \frac{1}{a_{ii}}\sum_{j=i+1}^{n}(-a_{ij}x_j^{(k)}) + \frac{1}{a_{ii}}b_i\right] + (1-\omega)x_i^{(k)} \quad (i = 1,2,\cdots,n) \tag{6.2.13}$$

写成矩阵形式，就是

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}(\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D})\,\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega\,(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b} \quad (k = 0,1,2,\cdots) \tag{6.2.14}$$

其迭代矩阵为 $\boldsymbol{B}_\omega = (\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}(\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D})$，另外 $\boldsymbol{f} = \omega(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$. 显然 $\omega = 1$ 时 SOR 迭代法就退化为 Gauss-Seidel 迭代法.

选取不同的松弛因子，显然收敛的快慢会有差别，这就引出了**最优松弛因子**的想法. 遗憾的是，对一般矩阵，目前尚无法确定最优松弛因子. 当然，对某些特殊矩阵，存在相关的理论结果. 感兴趣的读者请查阅有关文献.

上述三种古典迭代法非常容易编程实现，因此 Matlab 中没有提供相关的内置函数. 我们自己的编程实现请参考本书配套程序.

6.2.2　敛散性分析

下面我们分析古典迭代法的敛散性. 事实上，它们都满足式 (1.4.1). 首先，由式 (1.4.1) 可知

$$\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k-1)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x}^{(k-2)} - \boldsymbol{x}^*) = \cdots = \boldsymbol{B}^k(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*)$$

若 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$，则上式两边取极限，即得 $(\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k)(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$. 由于 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 是任意给定的，故系数矩阵 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k$ 必为零矩阵，即 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{O}$, 从而由定理 6.1.5 可知迭代矩阵的谱半径 $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$.

定理 6.2.1　对于任意的 $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n$ 和 $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$，迭代格式 (1.4.1) 收敛的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$.

证明：必要性已证，下证充分性.

显然，当 $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$ 时 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}$ 的特征值 $\lambda \in (0,2)$，因此 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}$ 是可逆矩阵，故迭代方程 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Bx} + \boldsymbol{f}$ 有唯一解，记为 $\boldsymbol{x}^*$. 注意到此时仍然有 $\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{B}^k(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*)$，且当 $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$ 时，由定理 6.1.5 知 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{O}$ 仍然成立. 因此 $\lim\limits_{k\to\infty}(\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*) = (\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{B}^k)(\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$，即 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$. 证毕.

上述判别法中的谱半径不易计算，我们同样可替换为更易计算的矩阵范数.

定理 6.2.2　对于任意的 $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n$ 和 $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$，若 $\|\boldsymbol{B}\| < 1$，则迭代格式 (1.4.1) 收敛.

进一步地，与以前的手法类似，我们还可以用范数给出迭代格式 (1.4.1) 的误差估计式. 当然条件也必须由 $\rho(\boldsymbol{B}) < 1$ 加强为 $\|\boldsymbol{B}\| < 1$.

定理 6.2.3　若迭代格式 (1.4.1) 中的迭代矩阵 $\boldsymbol{B}$ 满足 $\|\boldsymbol{B}\| < 1$，则成立如下误差估计式：

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{x}^*\| \leqslant \|\boldsymbol{B}\|^k \cdot \|\boldsymbol{x}^{(0)} - \boldsymbol{x}^*\| \tag{6.2.15}$$

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leqslant\frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\| \tag{6.2.16}$$

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-x^*\|\leqslant\frac{\|\boldsymbol{B}\|^k}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(1)}-x^{(0)}\| \tag{6.2.17}$$

其中，$\boldsymbol{x}^*$ 是迭代方程 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Bx}+\boldsymbol{f}$ 的精确解.

证明: 由于 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*)$，两边取范数可得

$$\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^*\|\leqslant\|\boldsymbol{B}\|\cdot\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\| \tag{6.2.18}$$

递推可知，$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leqslant\|\boldsymbol{B}\|^k\cdot\|\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^*\|$

同样地，对 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)})$ 两边取范数，可得

$$\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\|\leqslant\|\boldsymbol{B}\|\cdot\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\| \tag{6.2.19}$$

这样，结合范数的性质和式(6.2.18)，可知

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\|&=\|(\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*)-(\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^*)\|\\&\geqslant\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|-\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^*\|\geqslant(1-\|\boldsymbol{B}\|)\|\boldsymbol{x}^{(k)}-x^*\|\end{aligned}$$

注意到 $\|\boldsymbol{B}\|<1$，并结合式(6.2.19)即得

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leqslant\frac{1}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)}\|\leqslant\frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\|$$

由于对任意正整数 p，都有 $\|\boldsymbol{x}^{(p+1)}-\boldsymbol{x}^{(p)}\|\leqslant\|\boldsymbol{B}\|\cdot\|\boldsymbol{x}^{(p)}-\boldsymbol{x}^{(p-1)}\|$，因此反复递推上式可知

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|\leqslant\frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^{(k-1)}\|\leqslant\cdots\leqslant\frac{\|\boldsymbol{B}\|^k}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(0)}\|$$

由式(6.2.15)可知，范数 $\|\boldsymbol{B}\|$ 越接近零，则迭代格式(1.4.1)收敛的速度越快. 式(6.2.16)则指出了相邻解之差的某个倍数就是迭代解误差的上限，这样，当相邻两次迭代的误差足够小时，$\boldsymbol{x}^{(k)}$ 与精确解 $\boldsymbol{x}^*$ 也会足够靠近，因此式(6.2.16)可作为判断计算是否该终止的判停准则. 但当 $\|\boldsymbol{B}\|\approx 1$ 时，倍数 $\frac{\|\boldsymbol{B}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\gg 1$，这个准则变得不可靠.

按最佳逼近原理，在求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 时，还可以考虑使用**残差**(residual) $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}$. 一般应使用**相对残差**(relative residual)准则，即 $\frac{\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}^{(k)}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}\leqslant\varepsilon$，这里 ε 为相对残差上限.

对于线性方程组(6.2.1)，计算可知 $\|\boldsymbol{B}_J\|_1=\|\boldsymbol{B}_J\|_\infty=0.5<1$，根据定理6.2.2，使用 Jacobi 迭代法求解线性方程组(6.2.1)，结果是收敛的. 同样，由于 $\|\boldsymbol{B}_{GS}\|_\infty=0.5$，故用 Gauss-Seidel 迭代法求解线性方程组(6.2.1)，结果也是收敛的. 对线性方程组(6.2.11)，$\boldsymbol{B}_J$ 的几个常用范数值都大于1，进一步计算可知 $\boldsymbol{B}_J$ 的特征值全为零，因此 $\rho(\boldsymbol{B}_J)=0<1$，由定理6.2.1可知 Jacobi 迭代是收敛的. 但 $\boldsymbol{B}_{GS}$ 的特征值为 $0, 2\pm2\sqrt{2}$，即 $\rho(\boldsymbol{B}_{GS})=2(1+\sqrt{2})>1$，故 Gauss-Seidel 迭代是发散的.

用定理6.2.1来判断迭代法的敛散性，谱半径的计算显然是个瓶颈，而定理6.2.2

仅仅是充分判别法. 对 Jacobi 迭代而言，这两个判别法基本上够用了，因为 $\boldsymbol{B}_J$ 的计算比较容易. 但对 Gauss-Seidel 迭代来说，$\boldsymbol{B}_{GS}=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{U}$ 的计算涉及较复杂的求逆运算，显然不是很方便.

回看线性方程组 (6.2.1) 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$，易知 $\boldsymbol{A}$ 是三对角矩阵，这提醒我们如果能直接根据系数矩阵是否为某种特型或特性矩阵来判断敛散性，显然更加方便. 另外，使用矩阵范数尤其是仅仅对矩阵元素进行简单加工的 1 范数或 ∞范数，显然也可绕开谱半径这个瓶颈. 基于这两点，我们来考虑 Jacobi 迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_J=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A})$ 的 ∞范数 $\|\boldsymbol{B}_J\|$. 定理 6.2.2 要求 $\|\boldsymbol{B}_J\|<1$，也就是

$$\frac{1}{|a_{ii}|}(|a_{i1}|+|a_{i2}|+\cdots|a_{i,i-1}|+|a_{i,i+1}|+\cdots+|a_{in}|)<1\quad(i=1,2,\cdots,n)$$

此即

$$|a_{ii}|>\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|\quad(i=1,2,\cdots,n)\tag{6.2.20}$$

定义 6.2.1　如果实方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足式 (6.2.20)，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**严格对角占优矩阵**(strictly diagonally dominant matrix)；如果实方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足

$$|a_{ii}|\geqslant\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|\quad(i=1,2,\cdots,n)\tag{6.2.21}$$

且其中至少有一个严格不等式成立，则称 $\boldsymbol{A}$ 为**弱对角占优矩阵**(weakly diagonally dominant matrix).

定理 6.2.4　如果实方阵 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优，则 Jacobi 迭代和 Gauss-Seidel 迭代都收敛.

证明：若 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优，则必有 $|a_{ii}|>0$，因此 $\boldsymbol{D}$ 是可逆矩阵. 设 Jacobi 迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_J$ 的某个特征值 $|\lambda|\geqslant 1$，则矩阵 $\lambda\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}$ 也严格对角占优的，因而也是可逆的. 这是因为任何严格对角占优矩阵 $\boldsymbol{S}$ 肯定是可逆的，否则齐次线性方程组 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 必有非零解. 若令 $|x_i|=\|\boldsymbol{x}\|_\infty=1$，则有

$$|s_{ii}|=|s_{ii}x_i|=\left|-\sum_{j=1,j\neq i}^{n}s_{ij}x_j\right|\leqslant\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|s_{ij}\|x_j|\leqslant\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|s_{ij}|$$

这显然与 $\boldsymbol{S}$ 是严格对角占优矩阵相矛盾.

注意到 $\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J=\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})=\boldsymbol{D}^{-1}(\lambda\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U})$，因此 $\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J$ 也是可逆的，即其行列式 $|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_J|\neq 0$，这显然与 λ 是 $\boldsymbol{B}_J$ 的特征值相矛盾. 因此 $\boldsymbol{B}_J$ 的任意特征值的模均小于 1，故 $\boldsymbol{B}_J$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{B}_J)<1$，即 Jacobi 迭代收敛.

类似地，当 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优时，下三角矩阵 $\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}$ 也是可逆的. 设 Gauss-Seidel 迭代矩阵 $\boldsymbol{B}_{GS}$ 的某个特征值 $|\lambda|\geqslant 1$，则矩阵 $\lambda\boldsymbol{D}-\lambda\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}$ 也是严格对角占优的. 这是因为由式 (6.2.20) 可知

$$|\lambda a_{ii}|\geqslant\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|\lambda a_{ij}|=\sum_{j=1}^{i-1}|\lambda a_{ij}|+\sum_{j=i+1}^{n}|\lambda a_{ij}|\geqslant\sum_{j=1}^{i-1}|\lambda a_{ij}|+\sum_{j=i+1}^{n}|a_{ij}|$$

前面已证任何严格对角占优矩阵 $\boldsymbol{S}$ 肯定是可逆的，这样 $\lambda\boldsymbol{D}-\lambda\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U}$ 也是可逆的，因此由

$$\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_{GS}=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}(\lambda\boldsymbol{D}-\lambda\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U})$$

可知 $|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_{GS}|\neq 0$，这也与 λ 是 $\boldsymbol{B}_{GS}$ 的特征值相矛盾. 这就是说必有 $\rho(\boldsymbol{B}_{GS})<1$，即 Gauss-Seidel 迭代也是收敛的. 证毕.

最后，我们给出 SOR 迭代的必要和充分条件.

考虑 $\boldsymbol{B}_\omega=(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}[\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D}]$. 由于 $\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L}$ 是下三角矩阵，其逆 $(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}$ 自然也是下三角矩阵，且 $|(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}|=a_{11}^{-1}\ a_{22}^{-1}\ \cdots a_{nn}^{-1}=|\boldsymbol{D}|^{-1}$，而 $\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D}$ 是上三角矩阵，其行列式为 $|\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D}|=(1-\omega)^n a_{11}a_{22}\cdots a_{nn}=(1-\omega)^n|\boldsymbol{D}|$，因此

$$|\boldsymbol{B}_\omega|=|(\boldsymbol{D}-\omega\boldsymbol{L})^{-1}|\cdot|\omega\boldsymbol{U}+(1-\omega)\boldsymbol{D}|=(1-\omega)^n.$$

设 $\boldsymbol{B}_\omega$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，则 $|\boldsymbol{B}_\omega|=\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n=(1-\omega)^n$，从而

$$|1-\omega|^n=|\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n|=|\lambda_1|\cdot|\lambda_2|\cdots|\lambda_n|\leqslant(\rho(\boldsymbol{B}_\omega))^n$$

此即 $|1-\omega|\leqslant\rho(\boldsymbol{B}_\omega)$. 故当 SOR 迭代收敛，即当 $\rho(\boldsymbol{B}_\omega)<1$ 时，可知 $|1-\omega|<1$，即 $\omega\in(0,2)$

定理 6.2.5 对对角元都非零的实方阵 $\boldsymbol{A}$，若求解 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的 SOR 迭代是收敛的，则

$$0<\omega<2 \tag{6.2.22}$$

定理 6.2.5 说明收敛因子 ω 只能在 $(0,2)$ 内取值；那么反过来，对什么样的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$，SOR 迭代是收敛的呢?

定理 6.2.6 若实矩阵 $\boldsymbol{A}>0$，且 $\omega\in(0,2)$，则求解 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的 SOR 迭代是收敛的.

证明: 参见文献[74].

进一步地，也可以考虑对角占优的情形.

定理 6.2.7 如果实方阵 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优，且 $\omega\in(0,1)$，则求解 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的 SOR 迭代是收敛的.

证明: 与定理 6.2.4 类似，略去.

6.3 解线性方程组的现代迭代法

6.3.1 共轭梯度法

首先我们给出求解线性方程组的**变分原理**或 **Ritz 原理**.

定理 6.3.1 如果 n 阶实方阵 $\boldsymbol{A}>0$ 且 $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^n$，则

$$\boldsymbol{Ax}^*=\boldsymbol{b}\Leftrightarrow\varphi(\boldsymbol{x}^*)=\min_{x\in\mathbb{R}^n}\varphi(\boldsymbol{x}) \tag{6.3.1}$$

其中，$\varphi(\boldsymbol{x})$ 称为**二次泛函**，其表达式为

$$\varphi(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}-2\,\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ax})-2(\boldsymbol{x},\boldsymbol{b}) \tag{6.3.2}$$

证明: 直接计算可知 $\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = 2(a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n) - 2b_i$, $i = 1,2,\cdots,n$, 即

$$\nabla\varphi(\boldsymbol{x}) = 2(\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b})$$

若有 $\boldsymbol{x}^*$ 使得 $\varphi(\boldsymbol{x}^*) = \min\limits_{x\in\mathbb{R}^n}\varphi(\boldsymbol{x})$, 则由多元函数的极值理论可知 $\nabla\varphi(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0}$, 此即 $\boldsymbol{Ax}^* = \boldsymbol{b}$.

反之, 若有 $\boldsymbol{Ax}^* = \boldsymbol{b}$, 注意到 $\boldsymbol{A} > 0$ 及 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$, 则对任意 $y \in \mathbb{R}^n$, 有

$$\begin{aligned}
\varphi(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{y}) &= (\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{y}) - 2\,\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{y}) \\
&= (\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}^* + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}^* + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ay} - 2\,\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^* - 2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\
&= (\boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}^* + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ay} - 2\,\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^* - 2\,\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\
&= \varphi(\boldsymbol{x}^*) + \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ay} \geqslant \varphi(\boldsymbol{x}^*)
\end{aligned}$$

即 $\boldsymbol{x}^*$ 使得 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 达到极小点. 证毕.

变分原理指出求二次泛函 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 的极值可转化为求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, 但就求解线性方程组而言, 这里则强调其反方向的处理, 即求解 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的问题转化为求二次泛函 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 的极值.

对于求二次泛函 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 的极值, 一般先任意给定初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$, 并确定一个使得 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 的值变小即"下山"的方向 $\boldsymbol{p}^{(0)}$, 从而可在过点 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 的直线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(0)}$ 上找一点 $\boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha_0\boldsymbol{p}^{(0)}$, 即确定**步长** α_0, 使得对任意实数 α, 都有 $\varphi(x) \geqslant \varphi(x^{(1)})$, 也就是确定了该直线上的极小值点 $\boldsymbol{x}^{(1)}$. 接下来, 从 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 出发, 按**下山方向** $\boldsymbol{p}^{(1)}$, 在直线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(1)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(1)}$ 上确定 $\boldsymbol{x}^{(2)}$, 使得 $\varphi(\boldsymbol{x}^{(1)}) \geqslant \varphi(\boldsymbol{x}^{(2)})$, $\cdots$. 一般地, 从 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 出发, 按下山方向 $\boldsymbol{p}^{(k)}$, 在直线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)}$ 上搜索到一点 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$, 即确定步长 α_k, 使得 $\varphi(\boldsymbol{x}^{(k)}) \geqslant \varphi(\boldsymbol{x}^{(k+1)})$, 这里 $k = 0,1,2,\cdots$. 显然不同的步长和下山方向可得到不同的算法.

思考: 为什么是"下山"而不是"上山"?

如何确定 α_k 呢? 假定此时已知下山方向 $\boldsymbol{p}^{(k)}$, 则问题就是在直线 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)}$ 上求 $\varphi(x)$ 的极小值点 $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k\boldsymbol{p}^{(k)}$. 设

$$\begin{aligned}
f(\alpha) &= \varphi(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)}) = (\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)}) - 2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{p}^{(k)}) \\
&= \varphi(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \alpha^2\,(\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ap}^{(k)} - 2\alpha\,(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^{(k)}
\end{aligned}$$

其中, $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}^{(k)}$. 由极值理论, α_k 满足方程 $f'(\alpha) = 2\alpha\,(\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ap}^{(k)} - 2\,(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^{(k)} = 0$, 即

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^{(k)}}{(\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ap}^{(k)}} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)},\boldsymbol{p}^{(k)})}{(\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{Ap}^{(k)})} \tag{6.3.3}$$

接下来考虑如何确定下山方向 $\boldsymbol{p}^{(k)}$. 给定初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ 后, 显然易知残差 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}^{(0)}$. 根据 Gram-Schmidt 正交化的经验, 我们令 $\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)}$, 于是有

$$\alpha_0 = \frac{(\boldsymbol{r}^{(0)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^{(0)}}{(\boldsymbol{p}^{(0)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ap}^{(0)}} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(0)},\boldsymbol{p}^{(0)})}{(\boldsymbol{p}^{(0)},\boldsymbol{Ap}^{(0)})}, \quad \boldsymbol{x}^{(1)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \alpha_0\boldsymbol{p}^{(0)}, \quad \boldsymbol{r}^{(1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}^{(1)}$$

后面的各步, 如果仍选 $\boldsymbol{p}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}^{(k)}$, $k = 1,2,\cdots$, 此时的算法就是**最速下降法**(steepest descent method). 但这种算法是一种不稳定的算法, 因为当 $\boldsymbol{r}^{(k)}$ 较小时, 由

于舍入误差的影响，会偏离最速下降方向.

从迭代角度看，自然要用已算出的 $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ 来计算 $\boldsymbol{p}^{(k)}$. 由于我们希望 $\boldsymbol{p}^{(k)}$ 比 $\boldsymbol{r}^{(k)}$ 更好，同时希望运算量不大，因此自然想到在过点 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 且由 $\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ 和 $\boldsymbol{r}^{(k)}$ 所张成的二维平面 π_2 内选取 $\boldsymbol{p}^{(k)}$，即

$$\pi_2=\{\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta\boldsymbol{p}^{(k-1)},\xi,\eta\in\mathbb{R}\}$$

观察图 6 - 1 可知，图中 $\boldsymbol{r}^{(k)}\perp\boldsymbol{p}^{(k-1)}$. 这是因为，当 $\boldsymbol{r}^{(k)}\neq\boldsymbol{0}$ 时(若 $\boldsymbol{r}^{(k)}=\boldsymbol{0}$，则 $\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{x}^{(k)}$ 即为所求)，注意到 $\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^{(k-1)}+\alpha_{k-1}\boldsymbol{p}^{(k-1)}$，$\boldsymbol{r}^{(k-1)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k-1)}$ 以及式 (6.3.3)，则

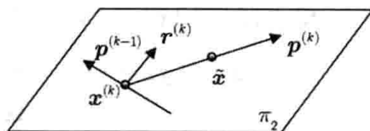


图 6 - 1　如何选取下山方向

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}^{(k-1)},\boldsymbol{r}^{(k)})&=(\boldsymbol{p}^{(k-1)},\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})=(\boldsymbol{p}^{(k-1)},\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k-1)}-\alpha_{k-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)})\\&=(\boldsymbol{p}^{(k-1)},\boldsymbol{r}^{(k-1)})-\alpha_{k-1}(\boldsymbol{p}^{(k-1)},\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)})=0\end{aligned}$$

同样地，我们考虑 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 在平面 π_2 内的极小值. 令

$$\begin{aligned}g(\xi,\eta)&=\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi(\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta\boldsymbol{p}^{(k-1)})\\&=(\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta\boldsymbol{p}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta\boldsymbol{p}^{(k-1)})-2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta\boldsymbol{p}^{(k-1)})\end{aligned}$$

分别对 ξ,η 求偏导数，并注意到 $\boldsymbol{r}^{(k)}\perp\boldsymbol{p}^{(k-1)}$，可得

$$\frac{\partial g}{\partial\xi}=2[\xi(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}-(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}]$$

$$\frac{\partial g}{\partial\eta}=2[\xi(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}+\eta(\boldsymbol{p}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}]$$

因此，$\varphi(\boldsymbol{x})$ 在平面 π_2 内的唯一极小值为 $\tilde{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\xi_0\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta_0\boldsymbol{p}^{(k-1)}$，其中 ξ_0,η_0 满足方程组

$$\begin{cases}\xi_0(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}+\eta_0(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}=(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}\\\xi_0(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}+\eta_0(\boldsymbol{p}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}=0\end{cases}\tag{6.3.4}$$

显然，当 $\boldsymbol{r}^{(k)}\neq\boldsymbol{0}$ 时，必有 $\xi_0\neq0$，否则由式 (6.3.4) 中第二个方程可知 $\eta_0(\boldsymbol{p}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}=0$，再由 $\boldsymbol{A}>0$ 即得 $\eta_0=0$(否则 $\boldsymbol{p}^{(k-1)}=\boldsymbol{0}$ 与已知矛盾). 因此可取下山方向为

$$\boldsymbol{p}^{(k)}=\frac{1}{\xi_0}(\tilde{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}^{(k)})=\boldsymbol{r}^{(k)}+\frac{\eta_0}{\xi_0}\boldsymbol{p}^{(k-1)}\quad(k=1,2,\cdots)$$

若记 $\beta_{k-1}=\dfrac{\eta_0}{\xi_0}$，则由式 (6.3.4) 中第二个方程可知 $\beta_{k-1}=-\dfrac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}}{(\boldsymbol{p}^{(k-1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k-1)}}$，因此

$$\beta_k=-\frac{(\boldsymbol{r}^{(k+1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}}{(\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}}=-\frac{(\boldsymbol{r}^{(k+1)},\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)})}{(\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)})}\quad(k=0,1,2,\cdots)\tag{6.3.5}$$

又因为 $\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{p}^{(k)}$，$\boldsymbol{p}^{(k+1)}=\boldsymbol{r}^{(k+1)}+\beta_k\boldsymbol{p}^{(k)}$，因此

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{p}^{(k)}) = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)} \quad (k = 0,1,2,\cdots) \tag{6.3.6}$$

其中，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}$ 已在计算 α_k 的式 (6.3.3) 中求出，所以我们可以利用递推式 (6.3.6) 来计算 $\boldsymbol{r}^{(k+1)}$.

可以证明，上述分析中得到的向量组 $\{\boldsymbol{r}^{(k)}\}$ 和 $\{\boldsymbol{p}^{(k)}\}$ 具有如下性质：

(1)对任意 $0 \leqslant i < j < k$，都有 $\boldsymbol{p}^{(i)} \perp \boldsymbol{r}^{(j)}$；

(2)对任意 $0 \leqslant i, j \leqslant k$，当 $i \neq j$ 时，都有 $\boldsymbol{r}^{(i)} \perp \boldsymbol{r}^{(j)}$；

(3)对任意 $0 \leqslant i, j \leqslant k$，当 $i \neq j$ 时，都有 $(\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}) = 0$；

(4) $\mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(k)}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{p}^{(k)}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}, \cdots, \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{r}^{(0)})$.

证明：使用归纳法. 当 $k = 1$ 时，注意到

$$\boldsymbol{p}^{(0)} = \boldsymbol{r}^{(0)},\ \boldsymbol{p}^{(1)} = \boldsymbol{r}^{(1)} + \beta_0 \boldsymbol{p}^{(0)},\ \boldsymbol{r}^{(1)} = \boldsymbol{r}^{(0)} - \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}$$

直接验算可知

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}) &= (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(0)}) - \alpha_0 (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(0)}) - (\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(0)}) = 0 \\
(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}) &= (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}) = 0 \\
(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(1)}) &= (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(1)} + \beta_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(1)}) + \beta_0 (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) \\
&= (\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(1)}) - (\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}) - (\boldsymbol{r}^{(1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = 0 \\
\mathrm{span}(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}) &= \mathrm{span}(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)} + \beta_0 \boldsymbol{p}^{(0)}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)} + \beta_0 \boldsymbol{r}^{(0)}) \\
&= \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(0)} - \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) \\
&= \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \alpha_0 \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)})
\end{aligned}$$

假设上述性质对 k 成立，下面证明它们对 $k+1$ 也成立.

(1)利用式 (6.3.6) 及归纳假设，可知对任意 $0 \leqslant i \leqslant k-1$，有

$$(\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) = (\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) - \alpha_k (\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = 0 - \alpha_k 0 = 0$$

又由式 (6.3.6) 和式 (6.3.3) 可知

$$(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) = (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) - \alpha_k (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) - (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) = 0$$

因此对 $k+1$，性质(1)也成立.

(2)由(1)的证明可知 $\boldsymbol{r}^{(k+1)} \perp \boldsymbol{p}^{(i)}$，$0 \leqslant i \leqslant k$，即 $\boldsymbol{r}^{(k+1)} \perp \mathrm{span}(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{p}^{(k)})$，由归纳假设，此即 $\boldsymbol{r}^{(k+1)} \perp \mathrm{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(k)})$，从而 $\boldsymbol{r}^{(k+1)} \perp \boldsymbol{r}^{(i)}$，$0 \leqslant i \leqslant k$，结合归纳假设可知对 $k+1$，性质(2)也成立.

(3)由归纳假设，$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$ 和 式 (6.3.6) 以及性质(2)可知，对 $0 \leqslant i \leqslant k-1$，有

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k+1)}) &= (\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k+1)}) + \beta_k (\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) \\
&= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) + 0 = \frac{1}{\alpha_i} (\boldsymbol{r}^{(i)} - \boldsymbol{r}^{(i+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) = 0
\end{aligned}$$

而由式 $\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$ 及式 (6.3.6) 可知

$$(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k+1)}) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k+1)}) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) + \beta_k (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)})$$

$$= (\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) - (\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = 0$$

故由归纳假设可知对 $k+1$，性质(3)也成立.

(4)由归纳假设可知 $\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)} \in \text{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}, \cdots, \boldsymbol{A}^k\boldsymbol{r}^{(0)})$，因此

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)} \in \text{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}, \cdots, \boldsymbol{A}^k\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}^{k+1}\boldsymbol{r}^{(0)})$$
$$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)} \in \text{span}(\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}, \cdots, \boldsymbol{A}^k\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{A}^{k+1}\boldsymbol{r}^{(0)})$$

由于性质(2)说明向量组 $\boldsymbol{r}^{(0)}, \boldsymbol{r}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{r}^{(k+1)}$ 和向量组 $\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{p}^{(k+1)}$ 都是线性无关的，因此可知对 $k+1$，性质(4)也成立.

由归纳法原理可知，上述性质都成立. 证毕.

利用上述性质，可知

$$(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{r}^{(k+1)}) = 0 - \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)})$$
$$= -\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)}) \tag{6.3.7}$$
$$(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{r}^{(k+1)}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) - 0$$
$$= \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k)} + \beta_{k-1}\boldsymbol{p}^{(k-1)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)}) + 0 = \frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)})$$

因此

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)})}{(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)})} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}}{(\boldsymbol{p}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}} \tag{6.3.8}$$

再结合式(6.3.5)、式(6.3.7)和式(6.3.8)，可知

$$\beta_k = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k+1)}, \boldsymbol{r}^{(k+1)})}{(\boldsymbol{r}^{(k)}, \boldsymbol{r}^{(k)})} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k+1)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k+1)}}{(\boldsymbol{r}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}} \tag{6.3.9}$$

这样我们就得到了 α_k 和 β_k 的简化计算公式.

由上所述，即得求解对称正定线性方程组的**共轭梯度法**(Conjugate Gradient)即 **CG 法**. 我们给出其 Matlab 代码实现如下：

```
function [x,iter]= conjgrad(A,b,x0,nmax,tol)
iter= 0;r= b- A* x0;err= norm(r)^2;x= x0;
while err> tol & iter< nmax
    iter= iter+ 1
    if( iter= = 1) p= r;
    else
        beta= err/errold; p= r+ beta* p;
    end
    v= A* p;%工作变量
    alpha= err/(p'* v); x= x+ alpha* p; r= r- alpha* v;
    errold= err; err= norm(r)^2;
 end
```

显然,共轭梯度法中每迭代一次,只涉及一次 BLAS2 级的运算. 测试表明,对方程组(6.2.1),同样取 $\boldsymbol{x}^{(0)}=(0,0,0)^{\mathrm{T}}$,使用上面的共轭梯度法,2 次迭代就得到了精确解.

Matlab 中也提供了内置函数 cgs,其语法为

```
x= cgs(A,b,tol,maxit)
```

其中,tol 用于指定计算精度,缺省值是 10^{-6}, maxit 用于指定最大迭代次数,缺省值是 $\min(n,20)$.

定义 6.3.1 对任意两向量 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}\in\mathbb{R}^n$,若它们的 $\boldsymbol{A}$ 内积为零,即 $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})_A=(\boldsymbol{p},\boldsymbol{A}\boldsymbol{q})=\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}=0$, 则称 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}$ 互相 $\boldsymbol{A}$ 正交或互相共轭(mutually conjugate).

定义 6.3.2　对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 和向量 $\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^n$, 记

$$\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r},k)=\mathrm{span}\{\boldsymbol{r},\boldsymbol{A}\boldsymbol{r},\cdots,\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{r}\} \tag{6.3.10}$$

并称之为 **Krylov 子空间.**

显然,上述几条性质也说明,共轭梯度法迭代产生的剩余向量组 $\boldsymbol{r}^{(0)},\boldsymbol{r}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{r}^{(k)}$ 是 Krylov 子空间 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k+1)$ 的一组正交基,而下山方向组 $\boldsymbol{p}^{(0)},\boldsymbol{p}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{p}^{(k)}$ 则是 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k+1)$ 的一组共轭正交基,这也给出了上述算法被命名的缘由.

关于共轭梯度法的敛散性,可以证明如下的误差估计式:

定理 6.3.2　用共轭梯度法求解对称正定线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, 得到的 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 满足

$$\|\boldsymbol{x}^{(k)}-\boldsymbol{x}^*\|_A\leqslant 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2}-1}{\sqrt{\kappa_2}+1}\right)^k\|\boldsymbol{x}^{(0)}-\boldsymbol{x}^*\|_A \tag{6.3.11}$$

其中, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{b}$, $\kappa_2=\kappa_2(\boldsymbol{A})$.

证明:请参考文献[71].

定理 6.3.2 说明,共轭梯度法的收敛快慢依赖于系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分布情况. 例如当 $\kappa_2\gg1$ 时,它的收敛相当慢. 当然,当 $\kappa_2\approx1$ 时(比如方程组(6.2.1)的系数矩阵),共轭梯度法会收敛得很快. 这就催生了一大类**预处理技术**(precondition technique),希望通过适当选择矩阵 $\boldsymbol{M}$, 将 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 转变成良态的 $\boldsymbol{A}'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}'$, 其中 $\boldsymbol{M}>0$, $\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{M}$, $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{b}'=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}$. 感兴趣的读者请查阅相关文献.

6.3.2　子空间迭代法

前面的共轭梯度法仅适用于系数矩阵 $\boldsymbol{A}>0$ 的情形,而在许多计算问题中,尽管 $\boldsymbol{A}$ 一般是稀疏矩阵,但却未必是对称的. 这就需要寻找新的算法.

考虑大型稀疏线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{6.3.12}$$

其中, $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是可逆矩阵, $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^n$ 也是已知的向量.

显然方程组(6.3.12)的解为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$. 我们将 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 展开为已知矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的多项式,以便使用迭代法. 联想到 Cayley-Hamilton 定理,设 $\varphi(\lambda)=\lambda^n+a_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+a_1\lambda+a_0$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式,则

$$\varphi(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^n+a_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1}+\cdots+a_1\boldsymbol{A}+a_0\boldsymbol{I}=\boldsymbol{O}$$

两边乘以 $\boldsymbol{A}^{-1}$，当 $a_0 \neq 0$ 时($a_0 = 0$ 是不可能的，为什么?)，有

$$\boldsymbol{A}^{-1} = -\frac{1}{a_0}(\boldsymbol{A}^{n-1} + a_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-2} + \cdots + a_1\boldsymbol{I})$$

从而 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = -\frac{1}{a_0}(\boldsymbol{A}^{n-1}b + a_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-2}\boldsymbol{b} + \cdots + a_1\boldsymbol{b})$，这说明 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b},n)$. 这样，利用 Krylov 子空间，我们就可在 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b},k)$ 中计算出 $\boldsymbol{x}^{(k)}$，并可逐步扩张到计算 $\boldsymbol{x}^{(n)} \in \mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b},n)$. 理论上，只需要 n 步迭代，就可得到 $\boldsymbol{x}^{(n)} = \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$.

注意，共轭梯度法中是用 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$ 构造出了 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k+1)$. 类似地，对方程组 (6.3.12)，若令 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{z}$，显然方程组 (6.3.12) 等价于方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{r}^{(0)} \tag{6.3.13}$$

这样，我们只需在 Krylov 子空间 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k)$ 中计算出 $\boldsymbol{z}^{(k)}$，进而可利用 $\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{z}^{(k)}$ 来确定 $\boldsymbol{x}^{(k)}$.

令 $\mathcal{K}_k = \mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k)$. 问题是如何在 $\mathcal{K}_k$ 中确定 $\boldsymbol{z}^{(k)}$ 呢? 也就是说采用什么样的原理，才能够在子空间 $\mathcal{K}_k$ 中得到方程组 (6.3.13) 的最佳近似解 $\boldsymbol{z}^{(k)}$ 呢? 对，最佳逼近! $\boldsymbol{z}^{(k)}$ 应该是 $\mathcal{K}_k$ 中的最佳逼近. 也就是说，残差 $\boldsymbol{r}^{(0)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}^{(k)}$ 应该与某个子空间 $\mathcal{L}_k$ 正交.

求解线性方程组 (6.3.11) 的 **Galerkin 原理**：在 $\mathcal{K}_k$ 中找方程组 (6.3.13) 的近似解 $\boldsymbol{z}^{(k)}$，使得残差 $\boldsymbol{r}^{(0)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}^{(k)}$ 和 $\mathcal{L}_k$ 中的所有向量都正交，即求 $\boldsymbol{z}^{(k)} \in \mathcal{K}_k$，使得

$$\boldsymbol{r}^{(0)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{z}^{(k)} \perp \boldsymbol{w}^{(k)} \quad (\forall \boldsymbol{w}^{(k)} \in \mathcal{L}_k) \tag{6.3.14}$$

这里，$\mathbb{R}^n$ 中的向量组 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k$ 和 $\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_k$ 分别张成 k 维子空间 $\mathcal{K}_k$ 和 $\mathcal{L}_k$.

令 $\boldsymbol{V}_k = (\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k)$，$\boldsymbol{W}_k = (\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_k)$. 由于 $\boldsymbol{z}^{(k)} \in \mathcal{K}_k$，故 $\boldsymbol{z}^{(k)}$ 可表示为

$$\boldsymbol{z}^{(k)} = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)},\ \boldsymbol{y}^{(k)} \in \mathbb{R}^k \tag{6.3.15}$$

从而式 (6.3.14) 就被改写为 $\boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r}^{(0)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}) = \boldsymbol{0}$，也就是

$$\boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(0)} \tag{6.3.16}$$

这就是 Galerkin 原理的矩阵形式. 假设 $\boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k$ 可逆，则由方程 (6.3.16) 可求出 $\boldsymbol{y}^{(k)}$，进而由式 (6.3.15) 即可得出方程组 (6.3.13) 的近似解 $\boldsymbol{z}^{(k)}$.

Galerkin 原理告诉我们，子空间 $\mathcal{K}_k$ 未必一定要选择 $\mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k)$. 这样就留下了巨大的空白(当然也创造了巨大的想象空间)，即如何选取右子空间 $\mathcal{K}_k$ 和左子空间 $\mathcal{L}_k$，以及如何选择它们的基底即向量组 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k$ 和 $\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_k$. 显然不同的选择给出了方程组 (6.3.13) 基于 Galerkin 原理的不同算法，统称为求解线性方程组的**投影类算法**(projection method)，其中取 $\mathcal{K}_k = \mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{r}^{(0)},k)$ 的算法统称为 **Krylov 子空间法**. 从计算量来看，这些子空间的规模一般要远远小于原来的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的规模，因此大规模问题被**降维**为中规模乃至小规模问题. 这就解释了何以近几十年来，Krylov 子空间法事实上已成为破解"维数灾难"的"灵丹妙药".

共轭梯度法其实也是一种 Krylov 子空间法，它实际上就是在 $\mathcal{K}_k = \mathcal{K}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b},k)$ 中选择 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 来极小化 $(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*)$.

在 Krylov 子空间法中，就 $\mathcal{L}_k$ 的选取而言，考虑到计算要简单，经常用到以下两种选

择，其一是取 $\mathcal{L}_k = \mathcal{K}_k$，这就是下面要讨论的 **Arnoldi 算法**，其中构造 $\mathcal{K}_k$ 的正交基 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{v}_2$，…，$\boldsymbol{v}_k$ 的过程被称为 **Arnoldi 过程**(process)，正交基 $\boldsymbol{v}_1$，$\boldsymbol{v}_2$，…，$\boldsymbol{v}_k$ 被称为 **Arnoldi 向量**.

由于张成 $\mathcal{K}_k$ 的 $\boldsymbol{r}^{(0)}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(0)}$，…，$\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{r}^{(0)}$ 是线性无关的(留作练习)，因此 Arnoldi 过程可采用 Gram-Schmidt 正交化过程，即

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}^{(0)}}{\|\boldsymbol{r}^{(0)}\|_2},\quad \widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k - \sum_{i=1}^{k} h_{ik}\boldsymbol{v}_i,\quad \boldsymbol{v}_{k+1} = \frac{\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}}{\|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|_2} \tag{6.3.17}$$

其中，$h_{ik} = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_i)$，并记 $h_{k+1,k} = \|\widetilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|_2$. 写成矩阵形式，就是

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 &= h_{11}\boldsymbol{v}_1 + h_{21}\boldsymbol{v}_2 \\
\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 &= h_{12}\boldsymbol{v}_1 + h_{22}\boldsymbol{v}_2 + h_{32}\boldsymbol{v}_3 \\
&\cdots\cdots \\
\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k &= h_{1k}\boldsymbol{v}_1 + \cdots + h_{kk}\boldsymbol{v}_k + h_{k+1,k}\boldsymbol{v}_{k+1}
\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{H}_k + \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}_{k+1}\widetilde{\boldsymbol{H}}_k \tag{6.3.18}$$

其中，$\boldsymbol{H}_k = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2k} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{k,k-1} & h_{kk} \end{pmatrix}$ 是上 **Hessenberg 矩阵**；，$\boldsymbol{u}_k = h_{k+1,k}\,\boldsymbol{v}_{k+1}$；$\boldsymbol{e}_k$ 是 k 阶单位矩阵的第 k 列；$\widetilde{\boldsymbol{H}}_k = \begin{pmatrix} \boldsymbol{H}_k \\ h_{k+1,k}\ e_k^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$ 是 $(k+1)\times k$ 阶矩阵，其最后一行除最后一个元素 $h_{k+1,k}$ 外全是零元素. 式 (6.3.18) 也被称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 **Hessenberg 分解**，其效果如图 6－2 所示. 注意到 $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{I}$ 及 $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{k+1} = \boldsymbol{0}$，用 $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}$ 左乘式 (6.3.18) 两边，即得

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{H}_k \tag{6.3.19}$$

$$\underset{n\times n}{\boldsymbol{A}}\ \underset{n\times k}{\boldsymbol{V}_k} = \underset{n\times k}{\boldsymbol{V}_k}\ \underset{k\times k}{\boldsymbol{H}_k} + \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}$$

图 6－2　矩阵 A 的 Hessenberg 分解

取 $\boldsymbol{W}_k = \boldsymbol{V}_k$ 并令 $\boldsymbol{\beta}_0 = \|\boldsymbol{r}^{(0)}\|_2$，则方程 (6.3.16) 变成了

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{\beta}_0\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_1 \tag{6.3.20}$$

注意到 $\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{e}_1$，这里 $\boldsymbol{e}_1$ 是 k 阶单位矩阵的第一列，再结合式 (6.3.19)，可知

$$\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{\beta}_0\boldsymbol{e}_1 \tag{6.3.21}$$

如果 $\boldsymbol{H}_k$ 可逆且 k 比较小，则可以用直接法求解方程组 (6.3.21)，进而求得原方程组 (6.3.12) 的近似解 $\boldsymbol{x}^{(k)}$. 这种求解方法被称为 **Arnoldi 完全正交化法**(Full Orthogonalization Method)，简称 **FOM 法**. 显然 FOM 法最大的问题是 $\boldsymbol{H}_k$ 可能奇异，此时算法会出现恶性中断.

关于 Arnoldi 算法的敛散性,可以证明如下的误差估计式:

定理 6.3.3　用 FOM 法得到的近似解 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 的残差的大小为

$$\|\boldsymbol{r}^{(k)}\|_2 = h_{k+1,k}\,|\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k| \tag{6.3.22}$$

证明:利用 $\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{z}^{(k)}$、式 (6.3.18) 及式 (6.3.21),并注意到 $\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{e}_1$,可知

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}^{(k)} &= \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}_k) = \boldsymbol{r}^{(0)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}_k \\
&= \beta_0\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{y}_k - \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k = \beta_0\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{V}_k\beta_0\boldsymbol{e}_1 - h_{k+1,k}\boldsymbol{v}_{k+1}\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k \\
&= -h_{k+1,k}(\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k)\boldsymbol{v}_{k+1}
\end{aligned}$$

由于 $\|\boldsymbol{v}_{k+1}\|_2 = 1$,因此 $\|\boldsymbol{r}^{(k)}\|_2 = h_{k+1,k}\,|\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_k|$. 证毕.

至此,我们可给出 FOM 法的 Matlab 代码实现如下:

```
function [x,err]= fom(A,b,x0,k)
r0= b- A* x0; beta= norm(r0);
[V,H] =  arnoldi(A,r0,k) % 使用 The Matrix Function Toolbox 中的程序
I= eye(k); e1= I(:,1); y= H(1:k,1:k)^(- 1)* (beta* e1);
x= x0+ V(:,1:k)* y;
err= H(k+ 1,k)* abs(y(k));
```

其中使用了 Nick Higham 开发的"The Matrix Function Toolbox",下载地址为 http://www.ma.man.ac.uk/~higham/mftoolbox.

在 Krylov 子空间法中,选取 $\mathcal{L}_k$ 的另一种方式就是取 $\mathcal{L}_k = \boldsymbol{A}\mathcal{K}_k$,这就得到了更有用的**广义极小残余法**(Generalized Minimum RESidual method),简称 **GMRES 法**,其好处是不会出现恶性中断,即式 (6.3.16) 中的矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k$ 肯定是可逆的.

事实上,设 $\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_k$ 是 $\mathcal{L}_k = \boldsymbol{A}\mathcal{K}_k$ 的一组基,则每个 $\boldsymbol{w}_i$ 都可以写成 $\boldsymbol{w}_i = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i$,其中 $\boldsymbol{u}_i \in \mathcal{K}_k$, $i = 1,2,\cdots,k$, 且 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k$ 是 $\mathcal{K}_k$ 的一组基. 设 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k$ 到 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{G}_k$,则

$$\boldsymbol{W}_k = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k)\boldsymbol{G}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{G}_k$$

从而 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{G}_k)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{G}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k)$,其中 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k) > 0$,注意到 $\boldsymbol{G}_k$ 可逆,因此矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是可逆的.

GMRES 法之所以被命名为广义极小残余算法,是因为按这种选取方式,并基于 Galerkin 原理计算近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$,等价于用 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 在 $\boldsymbol{x}^{(0)} + \mathcal{K}_k$ 中极小化 $R(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2$.

定理 6.3.4　用 GMRES 法得到的近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 极小化 $R(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2$,即

$$R(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \min R(\boldsymbol{x})$$

其中,$\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{x}^{(0)} + \mathcal{K}_k$.

证明:对任意 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{x}^{(0)} + \mathcal{K}_k$,显然有

$$\begin{aligned}
R(\boldsymbol{x}) &= \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}) - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}})\|_2^2 \\
&= R(\tilde{\boldsymbol{x}}) - 2(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}})) + \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}})\|_2^2 \\
&= R(\tilde{\boldsymbol{x}}) + \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}})\|_2^2 \geqslant R(\tilde{\boldsymbol{x}})
\end{aligned}$$

其中利用了 $(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}))=0$. 这是因为此时 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}})\in\mathcal{L}_k=\boldsymbol{A}\mathcal{K}_k$，因此根据 Galerkin 原理，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}})$ 与 $\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 正交. 这就证明了定理的必要性. 充分性的证明留作练习. 证毕.

我们仍用 Arnoldi 过程来构造 $\mathcal{K}_k$ 的正交基 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k$. 对任意 $\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{x}^{(0)}+\mathcal{K}_k$，有 $z=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{(0)}\in\mathcal{K}_k$，因此存在 $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^k$，使得 $z=\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}$，从而

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2&=\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^{(0)}+z)\|_2=\|\boldsymbol{r}^{(0)}-\boldsymbol{A}z\|_2=\|\boldsymbol{r}^{(0)}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}\|_2\\&=\|\boldsymbol{r}^{(0)}-\boldsymbol{V}_{k+1}\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y}\|_2=\|\beta_0\boldsymbol{v}_1-\boldsymbol{V}_{k+1}\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y}\|_2\\&=\|\beta_0\boldsymbol{V}_{k+1}\boldsymbol{e}_1-\boldsymbol{V}_{k+1}\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y}\|_2=\|\boldsymbol{V}_{k+1}(\beta_0\boldsymbol{e}_1-\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y})\|_2\\&=\|\beta_0\boldsymbol{e}_1-\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y}\|_2\end{aligned}$$

其中，$\boldsymbol{e}_1=(1,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}\in\mathbb{R}^{k+1}$，另外，最后一个等号利用了习题 5.23. 这样在 $\boldsymbol{x}^{(0)}+\mathcal{K}_k$ 中极小化 $R(\boldsymbol{x})$ 也就是在 $\mathcal{K}_k$ 中极小化 $\|\boldsymbol{\beta}_0\boldsymbol{e}_1-\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{y}\|_2^2$.

当 k 很大时，Arnoldi 过程非常耗时，而且 $\boldsymbol{V}_{k+1}$ 和 $\widetilde{\boldsymbol{H}}_k$ 的存储量也很大. 对于大型方程组，可限制 k 的最大值为 $m<n$，即取固定的 m，周期性地重新开始，这就得到了 **GMRES(m)法**.

Matlab 中提供了内置函数 gmres，可用于求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其语法为

```
x = gmres(A,b,m,tol,maxit)
```

其中 m 用于指定循环周期，tol 用于指定计算精度，缺省值是 10^{-6}，maxit 用于指定最大迭代次数，缺省值是 $\min(n/m,20)$.

6.3.3　那些年，那些事

“那些年，那些事”，主角当然是“那些人”. 参与发现“20 世纪十大算法”之 Krylov 子空间迭代法的，的确是“那些人”. 他们中，有英年早逝的天才，有城防工事的主管，有海军学院的将军，有誉满全球的“隐士”，有谦逊待人的智者，还有抽象与计算并长的先锋人物.

英语里面有个有趣的短语“agree to disagree”，意思是“保留各自意见，接受分歧的存在”，而不是“同意反对”. 而它最初的流行是拜两位著名科学家所赐. 1908—1909 年间，里兹(Walther Ritz，见图 6-3)和爱因斯坦就黑体辐射的数学表示及热力学第二定律的理论起源多次展开激烈争论. 最后双方仍然各执己见，于是两人正式发表声明，表示“agree to disagree”.

提出 Ritz 原理的正是这位天才里兹. 1897 年他进入苏黎世理工学院(ETH)，初习工程，后修物理，从而成了爱因斯坦的同学. 由于染上肺结核，1901 年他转入气候更适宜的哥廷根，师从希尔伯特，毕业论文涉及预测原子特征谱线的数学表达式. 1908 年，他出版长篇巨著，批评麦克斯韦-洛伦兹电磁理论，认为该理论与“发光的以太”的联系“本质上不适合于表示电动力学传播的复杂规律”，并认为光在媒介中不是被传播而是被反射. 和爱因斯坦论战后不久，他就因肺结核去了“更高级的法庭”.

伽辽金(Boris Galyorkin Galerkin，见图 6-4)的主要贡献在有限元上，Galerkin 原理当然是以他的名字来命名的. 从 1893 年起他就读于圣彼得堡大学力学系. 在就读期间，他积极参加政治活动，并于 1899 年加入俄国社会民主工党. 1905 年，因组织工程师罢工



图 6-3　里兹(1878—1909)



图 6-4　伽辽金(1871—1945)



图 6-5　克雷洛夫(1863—1945)

From: Seiji Fujino <fujino@ce.hiroshima-cu.ac.jp>
Date: Wed, 28 Feb 1996 09:16:38 +0900
Subject: W. E. Arnoldi

Today I received a sad news from Mrs. Flora Arnoldi that Walter Edwin Arnoldi passed away on Oct. 5, 1995 at the age of 77.

Almost all numerical analysts know the name of Arnoldi associated with the Arnoldi process, which is popular like as the Lanczos process in the iterative solution of matrix eigenvalue problem. He first presented the idea in his paper titled by "The principle of minimized iterations in the solution of the eigenvalue problem" in Quart. of Appl. Math., Vol.9 in 1951. However, while I had tried to look for his personal data, I did not come across anybody who mentioned this reference.

图 6-6　阿诺尔德逝世的消息



图 6-7　赫斯泰尼斯(1906—1991)



图 6-8　斯蒂费尔(1909—1978)

而被捕入狱.在狱中,他开始研究科学和工程问题.出狱后的 1908 年,他发表了在狱中写成的长文(该文有 130 页,标题也很长).

到了 1915 年,伽辽金发文,提出了用逼近法求解微分方程尤其是边值问题的思想,这区别于他的同事布勃诺夫(Ivan Grigoryevich Bubnov,1872—1919,俄罗斯海军工程师和潜艇设计师)早前提出的方法.布勃诺夫的方法被他本人视作 Ritz 方法的变体,而伽辽金则将自己提出的方法看成适用于更一般的微分方程的求解,而不是局限于特定的变分问题.事实上,他用可能的位移原理解释了自己的方法.Galerkin 方法以及 Galerkin 微分方程问题很快传遍了全世界,如今它们已成为力学、热力学、电磁学、流体动力学等学科中的算法基础. 到了 20 世纪 20 年代,他已经是世界闻名的科学家,在工程设计师中有很高的名望.1936 年,他被选为苏联科学院院士.1941 年,纳粹兵临城下,作为应对,列宁格勒市政府组建了城防工事委员会,他成了该委员会的实际负责人.后来,他被转移到莫斯科,并加入了苏联科学院的军事工程委员会.繁重的工作损害了他的健康.二战胜利后不久,他在莫斯科去世.

克雷洛夫(Aleksei Nikolaevich Krylov,见图 6-5)是苏联著名的数学家、力学家和船舶制造专家.1888 年他考入圣彼得堡海军学院船舶制造系,在切比雪夫的弟子科尔金(Aleksandr Korkin,1837—1908)的严格教导下,仅仅两年就毕业留校,并承继了科尔金的衣钵,一干就是 50 年.1900 年被委任为船舶模型实验中心的主任后,他做了大量工作,涉及船舶的浮力、稳定性、滚动与俯仰、振动、性能等理论以及罗盘理论,实现了欧拉提出的"海军科学"的构想.1914 年他入选俄罗斯科学院通讯院士,1916 年升为院士.1943 年因罗盘理论获苏联国家奖.他的女婿卡皮查(Pyotr L. Kapitsa,1894—1984)是 1978 年诺

贝尔物理奖的获得者之一. 为了确定力学系统的振动频率,克雷洛夫在 1931 年的一篇文章中建议使用幂法产生的向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x},\cdots$ 来确定特征多项式的系数,从而找到了特征值计算的新方法,超越了拉格朗日、拉普拉斯、雅可比等前辈. 为了纪念他,人们将 $\mathrm{span}\{\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x},\cdots\}$ 命名为 Krylov 子空间.

如图 6-6 所示,正如 *NA Digest*(数值分析文摘)中所言:"几乎所有的数值分析学者都是通过 Arnoldi 过程知道了阿诺尔德的大名."阿诺尔德(Walter Edwin Arnoldi, 1917—1995)发表于 1951 年的文章"*The principle of minimized iterations in the solution of the eigenvalue problem*"如今是数值线性代数领域被引用最多的文章(恐怕没有之一). 正是在该文中,他提出了 Arnoldi 迭代过程. 但是从图 6-6 中也可看出,这位"隐士"去世的消息几个月以后才为学术界所知晓. 关于阿诺尔德,我们只知道他 1937 年毕业于斯蒂文斯理工学院机械工程专业,两年后进入联合航空公司(UAC),直至 1977 年退休. 另外,他的研究兴趣涉及振动建模、高速数字计算机以及航空器螺旋桨的声学分析和气动分析.

赫斯泰尼斯(Magnus Rudolph Hestenes ,见图 6-7)如今因 CG 算法而被大家所熟知,尽管他本人谦逊地说:"这是我与我在 INA 的同事们多次讨论后的自然结果."这里的 INA(Institute for Numerical Analysis)位于加州大学洛杉矶分校(UCLA). 自从 1947 年被聘为 UCLA 教授后,直至 1973 年退休,他一直工作于此. 事实上,CG 算法是他多年研究探索的结晶.

赫斯泰尼斯的研究领域是变分理论和最优控制理论,这极大地影响了他解决数值分析问题的方式. 早在 1935 年,他就引入了"共轭"的思想,次年发展出构造共轭基的一种算法. 因为平淡无奇,哈佛的一位几何学教授指出这达不到发表要求. 但赫斯泰尼斯意识到共轭概念有很好的几何解释,而且几何中或许隐藏着用于确定椭球面中心的方法,它与共轭梯度法是等价的. 到了 1951 年,他更是撰文,用二次型讨论变分问题,其中起主要作用的是他引入的术语"Q 正交".

1949 年,赫斯泰尼斯受邀加入 INA,并参与了一个"求解线性方程组以及矩阵的特征值和特征向量"的讨论班. 大家分别从理论和计算视角讨论了已知的各种求解方法,并借助于变分原理和几何意义,将线性方程组的求解问题转化为确定椭球面的中心,还尝试了各种步长. 两年后,为参加 INA 举办的一场国际研讨会,赫斯泰尼斯被大家公认为最有权力来撰写讨论班的成果,于是 CG 算法见诸于文字. 1954 年,由于 CG 算法,他荣获古根海姆奖,并被邀请在阿姆斯特丹举行的国际数学家大会上做报告.

斯蒂费尔(Eduard L. Stiefel,见图 6-8)不仅终其一生都未接受过纯数学与应用数学之划分,还一直致力于两者的融合,可谓理论与计算并长的先锋人物. 1928 年他入读瑞士联邦理工学院,并于 3 年后获得数学学士学位. 1935 年,他凭流形上的向量场的基础研究获得 ETH 博士学位. 在博士论文中,他引入了著名的 Stiefel 示性类以及连续群的 Stiefel 图. 1943 年起他被 ETH 聘为教授,并在 1946—1948 年间担任数学和物理系主任. 为实现其融合数学的梦想,"大权在握"的他开始大施拳脚,于 1948 年创立了应用数学研究所,以推进数值分析研究. 同时,他委派助手去美国学习当时最新的计算技术. 次年,他获悉康拉德·祖萨(Konrad Zuse,1910—1995,独立开发出世界上第一台采用二进制和布尔逻辑的可编程计算机)发明出 Z4,马上为 ETH 订购了一台. 借助于 Z4 的威力,ETU

很快跻身于最前沿的数值计算中心之列，而且还在1951年开设出计算机程序设计课程（包括上机实习），这在欧洲大陆尚属首次. 斯蒂费尔和他的助手们也陆续收获了qd算法、ALGOL语言和CG算法等突破性成果. 为了造出瑞士第一台计算机ERMETH，他于1951年赴美交流，并参加了INA的研讨会. 一看到赫斯泰尼斯的大会报告，他吃惊地发现这也是他的演讲主题，而且他已经在Z4上成功地实现了这种算法. 赫斯泰尼斯于是邀请他在美逗留一个学期，这样两人合作出了1952年那篇著名的论文，CG算法正式问世.

还有一位重量级人物，我们将留待下一章再请他出场.

6.4　函数矩阵及 λ 矩阵

由于向量和数都可看成特殊的矩阵，因此函数 f 可视为矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 到矩阵 $\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{p\times q}$ 的映射，即映射 $f:\mathbb{C}^{m\times n}\mapsto\mathbb{C}^{p\times q}$，只是不同的函数 f 依赖于不同的 m,n,p,q 以及不同的对应规则.

依据定义域和值域的情形，可以将 f 大致分为如下四种情况：

(1)**普通函数**：定义域是数集，值域也是数集，比如实函数、复函数等. 这就是传统的函数.

(2)**标量函数**：定义域是矩阵或向量，值域是数集，比如行列式、秩、二次型、迹、范数等. 这时的 f 显然也符合传统意义上的函数概念.

(3)**函数矩阵**：定义域是数集，值域是矩阵或向量，比如梯度、λ 矩阵等.

(4)**矩阵值函数**：定义域是矩阵或向量，值域也是矩阵或向量，比如初等变换、相似变换、矩阵多项式和矩阵指数函数等矩阵函数、求特征值、求主元列，等等.

标量函数我们已经比较熟悉，本节和下一节我们分别探讨函数矩阵和矩阵函数.

6.4.1　函数矩阵

同前面一样，我们既可以从微观的元素层面来处理函数矩阵，也可以从宏观的算子层面来研究函数矩阵. 我们仍然灵活使用这两种视角来建立函数矩阵的微积分，但更多地使用后者，因为它不仅简单，而且还能揭示概念形成的模式.

定义 6.4.1　称 $m\times n$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}(t)=(a_{ij}(t))$ 为 $m\times n$ 阶的**函数矩阵**(function matrix)，其中的元素 $a_{ij}(t)$ $(i=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,n)$ 为数域 $\mathbb{R}$ 上关于实数 t 的函数.

特别地，当 $m=1$ 时 $\boldsymbol{A}(t)$ 是一个函数行向量；当 $n=1$ 时 $\boldsymbol{A}(t)$ 是一个函数列向量. 两者统称**向量函数**(vector-valued function).

显然函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 是实数域 $\mathbb{R}$ 到矩阵空间 $\mathbb{C}^{m\times n}$ 的映射，向量函数 $\boldsymbol{x}(t)$ 则是实数域 $\mathbb{R}$ 到向量空间 $\mathbb{C}^n$ 的映射，因此有些书中将前者称为**矩阵值函数**，将后者称为**向量值函数**.

另外，在本小节中，为避免叙述繁琐，我们限定了 t 为实数，但这并不意味着不存在定义在 $\mathbb{C}$ 上的函数矩阵，比如下一小节的 λ 矩阵.

若视函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 中的元素 $a_{ij}(t)$ 为“数”，即将 t 固定，则函数矩阵的加法、数乘、乘法、转置与常数矩阵的相应运算相同，方函数矩阵的行列式计算与常数矩阵也相同.

定义 6.4.2　如果对 n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$，存在 n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{B}(t)$，使得

$$\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{B}(t) = \boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{A}(t) = \boldsymbol{I}_n \tag{6.4.1}$$

则称 n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 是**可逆的**(inverse)，并称 $\boldsymbol{B}(t)$ 为 $\boldsymbol{A}(t)$ 的逆矩阵，记为 $\boldsymbol{B}(t) = \boldsymbol{A}^{-1}(t)$.

定理 6.4.1　n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $[a,b]$ 上是可逆的，当且仅当 $\boldsymbol{A}(t)$ 的行列式 $|\boldsymbol{A}(t)|$ 在 $[a,b]$ 上不处处为零，且 $\boldsymbol{A}^{-1}(t) = \dfrac{1}{|\boldsymbol{A}(t)|}\mathrm{adj}\boldsymbol{A}(t)$，这里 $\mathrm{adj}\boldsymbol{A}(t)$ 为 $\boldsymbol{A}(t)$ 的伴随矩阵.

特别要注意其中的条件“不处处为零”. 例如 $\boldsymbol{A}(t) = \begin{pmatrix} t & 1 \\ 1 & t \end{pmatrix}$ 在 $[2,3]$ 上是可逆的，但在 $[0,2]$ 上却不是可逆的，因为当 $t = 1$ 时 $|\boldsymbol{A}(t)| = 0$.

定义 6.4.3　设有函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t) = (a_{ij}(t))_{m\times n}$. 如果函数 $a_{ij}(t)$ ($i = 1,2,\cdots,m$; $j = 1,2,\cdots,n$)在 $t = t_0$ 处都有极限 a_{ij}，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $t = t_0$ 处有**极限** $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{m\times n}$，记为 $\lim\limits_{t\to t_0}\boldsymbol{A}(t) = \boldsymbol{A}$. 如果 $\boldsymbol{A}(t_0) = \boldsymbol{A}$，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $t = t_0$ 处**连续**.

使用宏观视角，可重新给出如下定义.

定义 6.4.4　设有函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$. 如果 $\lim\limits_{t\to t_0}\|\boldsymbol{A}(t) - \boldsymbol{A}\| = 0$，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $t = t_0$ 处有**极限** $\boldsymbol{A}$，记为 $\lim\limits_{t\to t_0}\boldsymbol{A}(t) = \boldsymbol{A}$. 如果 $\boldsymbol{A}(t_0) = \boldsymbol{A}$，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $t = t_0$ 处**连续**.

易知函数矩阵求极限的加减法、数乘、乘法等运算法则与函数极限的相应运算法则相同. 实际上，后者可视为前者的维数退化为 1×1 时的情形，即前者的特殊情形；前者是后者在矩阵维数上的推广，这种推广保留了后者的许多性质.

定义 6.4.5　设有函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t) = (a_{ij}(t))_{m\times n}$. 如果每个元素 $a_{ij}(t)$ 在点 t 都可微，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在点 t **可导**或**可微**，称矩阵 $(a_{ij}'(t))_{m\times n}$ 为其导数，并记为 $\boldsymbol{A}'(t)$ 或 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(t)$.

定义 6.4.6　若函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在区间 (a,b) 内每一点都可导，则称 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 (a,b) 内**可导**或**可微**.

联想到普通函数 $f(t)$ 的导数 $f'(t)$ 满足 $\lim\limits_{h\to 0}\left|\dfrac{f(t+h)-f(t)}{h} - f'(t)\right| = 0$，我们可给出函数矩阵可微的宏观视角.

定义 6.4.7　已知函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$，若函数矩阵 $\boldsymbol{B}(t)$ 满足

$$\lim_{h\to 0}\left\|\frac{\boldsymbol{A}(t+h)-\boldsymbol{A}(t)}{h} - \boldsymbol{B}(t)\right\| = 0$$

则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 可微或可导，称 $\boldsymbol{B}(t)$ 为 $\boldsymbol{A}(t)$ 的导数，并记为 $\boldsymbol{A}'(t)$ 或 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(t)$.

函数矩阵的导数运算也具有许多与普通函数的导数运算相同的性质，即它仍然保留了后者的许多性质.

定理 6.4.2　(线性运算法则)

(1)两个可导函数之和仍然可导,且 $(\boldsymbol{A}(t)\pm\boldsymbol{B}(t))'=\boldsymbol{A}'(t)\pm\boldsymbol{B}'(t)$;

(2)可导函数的常数倍仍然可导,且 $(k\boldsymbol{A}(t))'=k\boldsymbol{A}'(t)$;

(3)若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 t 无关,则 $(\boldsymbol{AB}(t))'=\boldsymbol{AB}'(t)$.

定理 6.4.3 (乘积求导法则)

(1)可导的普通函数与可导的矩阵函数的乘积仍然可导,且

$$(k(t)\boldsymbol{A}(t))'=k'(t)\boldsymbol{A}(t)\pm k(t)\boldsymbol{A}'(t)$$

(2)两个可导的函数矩阵之积仍然可导,且

$$[\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{B}(t)]'=\boldsymbol{A}'(t)\boldsymbol{B}(t)+\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{B}'(t)$$

(3)若 $u=f(t)$ 是 t 的可导函数,则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(u)=f'(t)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\boldsymbol{A}(u)$$

(4)两个可导的向量函数的内积仍然可导,且

$$(\boldsymbol{x}(t),\boldsymbol{y}(t))'=(\boldsymbol{x}'(t),\boldsymbol{y}(t))+(\boldsymbol{x}(t),\boldsymbol{y}'(t)) \tag{6.4.2}$$

逆矩阵的情况又如何?对式(6.4.1)两边求导,可知

$$\boldsymbol{A}'(t)\boldsymbol{B}(t)+\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{B}'(t)=(\boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{A}(t))'=(\boldsymbol{I}_n)'=\boldsymbol{O}$$

因此 $\boldsymbol{B}'(t)=-\boldsymbol{A}^{-1}(t)\boldsymbol{A}'(t)\boldsymbol{B}(t)$.

定理 6.4.4 (**逆求导法则**)设 $\boldsymbol{A}(t)$ 是可逆的可导矩阵,则 $\boldsymbol{A}^{-1}(t)$ 也可导,并且

$$[\boldsymbol{A}^{-1}(t)]'=-\boldsymbol{A}^{-1}(t)\cdot\boldsymbol{A}'(t)\cdot\boldsymbol{A}^{-1}(t)$$

特别地,当 $\boldsymbol{A}(t)$ 退化为 1×1 阶的函数 $f(t)$ 时,上式即为

$$[f^{-1}(t)]'=-f^{-2}(t)f'(t)=-f^{-1}(t)f'(t)f^{-1}(t)$$

遗憾的是,微积分的链式法则对函数矩阵并不成立.例如对函数 $p(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^2(t)$,显然

$$[\boldsymbol{A}^2(t)]'=\boldsymbol{A}'(t)\cdot\boldsymbol{A}(t)+\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{A}'(t)\neq2\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{A}'(t)$$

当然,我们也注意到,若补充条件 $\boldsymbol{A}'(t)\cdot\boldsymbol{A}(t)=\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{A}'(t)$,则链式法则成立,即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p(\boldsymbol{A})=p'(\boldsymbol{A})\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(t)$$

定义 6.4.8 设有函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$,如果 $\boldsymbol{A}'(t)$ 仍然是可导的函数矩阵,则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ **二阶可导或二阶可微**,称 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}'(t)$ 为其二阶导数,记为 $\boldsymbol{A}''(t)$ 或 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\boldsymbol{A}(t)$.

一般地,不难定义函数矩阵的高阶导数.

例 6.4.1 设函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)=\begin{pmatrix}1&t^2\\t&0\end{pmatrix}(t\neq0)$,求 $[\boldsymbol{A}^{-1}(t)]'$.

解:由于函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 是 2 阶的,所以我们使用定理 6.4.1.因为

$$\boldsymbol{A}^{-1}(t)=\frac{1}{|\boldsymbol{A}(t)|}\mathrm{adj}\boldsymbol{A}(t)=\frac{1}{-t^3}\begin{pmatrix}0&-t^2\\-t&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&t^{-1}\\t^{-2}&-t^{-3}\end{pmatrix}$$

所以 $[\boldsymbol{A}^{-1}(t)]'=\begin{bmatrix}0 & -t^{-2}\\ -2t^{-3} & 3t^{-4}\end{bmatrix}(t\neq 0)$.

例 6.4.2　设 n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)=(a_{ij}(t))$，证明 $[\mathrm{tr}\boldsymbol{A}(t)]'=\mathrm{tr}\boldsymbol{A}'(t)$.

证明： $[tr\boldsymbol{A}(t)]'=[a_{11}(t)+\cdots+a_{nn}(t)]'=a'_{11}(t)+\cdots+a'_{nn}(t)=\mathrm{tr}\boldsymbol{A}'(t)$. 证毕.

此例意味着求迹运算与求导运算可以交换次序. 注意到矩阵的迹是线性的标量函数，即

$$\mathrm{tr}(k\boldsymbol{A})=k\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}),\quad \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{B})$$

那么，对任意的线性标量函数 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}(\boldsymbol{A}(t))$，是否仍然成立 $[\boldsymbol{l}(\boldsymbol{A}(t))]'=\boldsymbol{l}(\boldsymbol{A}'(t))$ 呢？事实上，可以证明这种推广也是正确的.

下面我们考察函数矩阵的积分.

定义 6.4.9　设有 $m\times n$ 阶函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)=(a_{ij}(t))_{m\times n}$，如果 $\boldsymbol{A}(t)$ 的每个元素 $a_{ij}(t)$ 都在 $[a,b]$ 上可积，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $[a,b]$ 上**可积**，并称矩阵 $\left(\int_a^b a_{ij}(t)\mathrm{d}t\right)_{m\times n}$ 为其积分，记为 $\int_a^b\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t$.

容易验证函数矩阵的积分具有下列性质：

定理 6.4.5(线性运算) 设 $\boldsymbol{A}(t)$ 和 $\boldsymbol{B}(t)$ 都在 $[a,b]$ 上可积，$\lambda,\mu\in\mathbb{C}$，则

$$\int_a^b[\lambda\boldsymbol{A}(t)+\mu\boldsymbol{B}(t)]\mathrm{d}t=\lambda\int_a^b\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t+\mu\int_a^b\boldsymbol{B}(t)\mathrm{d}t$$

定理 6.4.6　(乘积运算) 设 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $[a,b]$ 上可积，$\boldsymbol{P}$、$\boldsymbol{Q}$ 为常数矩阵，则

$$\int_a^b\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{Q}\mathrm{d}t=\boldsymbol{P}\cdot\int_a^b\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t\cdot\boldsymbol{Q}$$

定理 6.4.7　(微积分基本定理) 设 $\boldsymbol{A}(t)$ 在 $[a,b]$ 上连续，则对任意 $t\in(a,b)$，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_a^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s=\boldsymbol{A}(t)$$

定理 6.4.8　(牛顿-莱布尼兹公式) 设 $\boldsymbol{A}'(t)$ 在 $[a,b]$ 上连续，则

$$\int_a^b\boldsymbol{A}'(t)\mathrm{d}t=\boldsymbol{A}(b)-\boldsymbol{A}(a)$$

例 6.4.3　设函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)=\begin{pmatrix}1 & t^2\\ t & 0\end{pmatrix}$，求 $\int_0^6\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t$.

解： $\int_0^6\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t=\begin{bmatrix}\int_0^6\mathrm{d}t & \int_0^6 t^2\mathrm{d}t\\ \int_0^6 t\mathrm{d}t & 0\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}6 & 72\\ 18 & 0\end{pmatrix}$

类似地，可以定义函数矩阵的不定积分.

Matlab 中提供了内置函数 diff，除了具备数值微分计算功能外，也可用于对符号表达式进行微分运算. 就符号计算而言，函数 diff 的调用格式有以下几种：

(1)diff(expr, v) 和 diff(expr, sym('v')) 对表达式 expr 关于自变量 v 求导，其中的

自变量 v 可由 symvar 缺省指定；

(2)diff(expr, n)对表达式 expr 求 n 阶导数，缺省为 n=1；

(3)diff(expr, v, n) 和 diff(expr, n, v)对表达式 expr 关于自变量 v 求 n 阶导数，缺省同前.

注意，这里的表达式 expr 既可以是多元函数，也可以是函数矩阵、后文要介绍的含参矩阵函数(本质上也是函数矩阵)等符号矩阵.

Matlab 中也提供了内置函数 int，可用于求数值积分和符号积分，调用格式为

```
int(f,v),int(f,v,a,b),
```

但 Matlab 将来会取消这种调用格式，而代之以更严格的 int(sym(f),...).

6.4.2 λ 矩阵及其 Smith 标准型

对 λ 矩阵，我们并不陌生. 事实上，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征矩阵 $\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 就是最典型的 λ 矩阵. 利用 λ 矩阵，我们可以得到常数矩阵 Jordan 标准型的另一种计算方式，与 2.5 节给出的基于空间分解的算法相比，正可谓“殊途同归”.

定义 6.4.10 设有函数矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)=(a_{ij}(\lambda))_{m\times n}$，如果其元素 $a_{ij}(\lambda)$ 都为数域 $\mathbb{F}$ 上关于字母 λ 的多项式函数，则称 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 为 **λ 矩阵**.

这里使用字母 λ 而不是字母 x 来表示未知数只是历史的习惯. 当我们将 λ 固定时，同样将 λ 矩阵特殊化为常数矩阵.

由于关于 λ 的多项式的和、差、积仍然是 λ 的多项式，因此 λ 矩阵的和、差、数乘、乘积仍然是 λ 矩阵.

定理 6.4.9 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 可逆的充要条件是其行列式为非零的常数，即 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|=c\neq 0$.

证明：必要性. 设函数矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 可逆，则有 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}(\lambda)$，使得

$$\boldsymbol{A}(\lambda)\boldsymbol{B}(\lambda)=\boldsymbol{B}(\lambda)\boldsymbol{A}(\lambda)=\boldsymbol{I}$$

两边取行列式，并由柯西定理可知 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|\cdot|\boldsymbol{B}(\lambda)|=|\boldsymbol{I}|=1$，因此 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|$ 与 $|\boldsymbol{B}(\lambda)|$ 都只能是 λ 的零次多项式即常数，即 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|$ 为非零的常数.

充分性. 设 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|=c\neq 0$，则由定理 6.4.1 可知矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 可逆，从而其逆矩阵为 $c^{-1}adj\boldsymbol{A}(\lambda)$，显然这也是一个 λ 矩阵. 证毕.

矩阵的初等变换是化简矩阵的重要工具，我们自然也将之引入到 λ 矩阵之中.

定义 6.4.11 对 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的**初等变换**指的是下列三种变换：

(1)**交换变换**，即交换矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 i,j 两行(列)，记为 r_{ij} (c_{ij})；

(2)**数乘变换**，即将 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第 i 行(列)乘以非零常数 k，记为 $r_i(k)$ ($c_i(k)$)；

(3)**倍加变换**，即将 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第 i 行(列)乘以多项式 $\varphi(\lambda)$ 后加到 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第 j 行(列)，记为 $r_{ij}(\varphi)$ ($c_{ij}(\varphi)$).

定义 6.4.12 如果 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 经过有限次的初等变换化成 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}(\lambda)$，则称矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ **等价**，记为 $\boldsymbol{A}(\lambda)\sim\boldsymbol{B}(\lambda)$.

定理 6.4.10 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 等价的充要条件是存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}(\lambda)$、$\boldsymbol{Q}(\lambda)$，使得

$$\boldsymbol{B}(\lambda)=\boldsymbol{P}(\lambda)\boldsymbol{A}(\lambda)\boldsymbol{Q}(\lambda)$$

证明: 略.

对上式两边求行列式,并注意到 $|\boldsymbol{P}(\lambda)|$ 和 $|\boldsymbol{Q}(\lambda)|$ 都是非零的常数,因此 $|\boldsymbol{B}(\lambda)|$ 是 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|$ 的常数倍,即等价的 λ 矩阵的行列式只能相差一个常数因子.

定理 6.4.10 的结论显然与常数矩阵一致.事实上,作为常数矩阵的推广,λ 矩阵还有许多与常数矩阵类似的性质,比如下面的标准型:

定义 6.4.13　形如下面的 $m \times n$ 阶 λ 矩阵

$$\boldsymbol{J}(\lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{D}(\lambda) & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \boldsymbol{D}(\lambda) = \operatorname{diag}(d_1(\lambda), d_2(\lambda), \cdots, d_r(\lambda)), \quad 0 \leqslant r \leqslant \min(m,n)$$

称为 **Smith 标准型**(Smith normal form),其中非零"对角元" $d_1(\lambda), d_2(\lambda), \cdots, d_r(\lambda)$ 都是首项系数为 1 的多项式(称为**首一多项式**),并且 $d_i(\lambda) \mid d_{i+1}(\lambda)$, $i = 1, 2, \cdots, r-1$.

定理 6.4.11　任意 $m \times n$ 阶的 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 都有一个等价的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$.

定理的证明需要一个引理.

引理 6.4.1　设 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 左上角的元素 $a_{11}(\lambda) \neq 0$,且 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 中至少有一个元素不能被 $a_{11}(\lambda)$ 整除,则一定可以找到一个与等价的 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}(\lambda)$,其左上角元素 $b_{11}(\lambda) \neq 0$,且 $b_{11}(\lambda)$ 的次数比 $a_{11}(\lambda)$ 的次数低.

证明: 根据 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 中不能被整除的元素所在的位置,分三种情况讨论.

(1)在 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第一列中有一个元素 $a_{i1}(\lambda)$ 不能被整除,即有 $a_{i1}(\lambda) = a_{11}(\lambda)q(\lambda) + r(\lambda)$,其中余式 $r(\lambda) \neq 0$,且其次数比 $a_{11}(\lambda)$ 的次数低.

对 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 作两次初等行变换:先执行倍加变换 $r_{1i}(-q)$,将 $(i,1)$ 位置上的元素 $a_{i1}(\lambda)$ 变成 $r(\lambda)$,再执行交换变换 r_{1i},将 $(i,1)$ 位置上的元素 $r(\lambda)$ 交换至 $(1,1)$ 位置,即得所求的 $\boldsymbol{B}(\lambda)$.

(2)在 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第一行中有一个元素 $a_{1j}(\lambda)$ 不能被整除.这种情况与(1)类似.

(3) $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的第一列和第一行中的元素都可以被 $a_{11}(\lambda)$ 整除,但在其他位置有一个元素 $a_{ij}(\lambda)$ $(i,j>1)$ 不能被 $a_{11}(\lambda)$ 整除.

设 $a_{i1}(\lambda) = a_{11}(\lambda)\varphi(\lambda)$. 对 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 作两次初等行变换:先执行倍加变换 $r_{1i}(-\varphi)$,将 $(i,1)$ 位置上的元素 $a_{i1}(\lambda)$ 变成 0,此时 (i,j) 位置上的元素 $a_{ij}(\lambda)$ 变成了 $a_{ij}(\lambda) - a_{1j}(\lambda)\varphi(\lambda)$;再执行倍加变换 $r_{i1}(1)$,此时 $(1,1)$ 位置上仍然是 $a_{11}(\lambda)$,但 $(1,j)$ 位置上则变成了 $b_{1j} = a_{ij}(\lambda) + a_{1j}(\lambda)(1-\varphi(\lambda))$,显然 b_{1j} 不能被 $a_{11}(\lambda)$ 整除(否则 $a_{ij}(\lambda)$ 能被 $a_{11}(\lambda)$ 整除,出现矛盾).这就变成了(2)的情形.证毕.

证明定理 6.4.11: 设 $a_{11}(\lambda) \neq 0$,否则总可以经过行列调整,使得 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 左上角的元素不为零.

若 $a_{11}(\lambda)$ 不能整除 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的所有元素,则由引理 6.4.1,可以找到与 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}_1(\lambda)$,其左上角元素 $b_1(\lambda) \neq 0$,并且次数比 $a_{11}(\lambda)$ 的次数低.如果 $b_1(\lambda)$ 还不能整除 $\boldsymbol{B}_1(\lambda)$ 的所有元素,则由引理 6.4.1,可以继续找到与 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}_2(\lambda)$,其左上角元素 $b_2(\lambda) \neq 0$,并且次数比 $b_1(\lambda)$ 的次数低……由于多项式的次数是非零整数,因此在有限步之后,一定会得到一个与 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵 $\boldsymbol{B}_s(\lambda)$,其左上角元素 $b_s(\lambda)$ 可以整除 $\boldsymbol{B}_s(\lambda)$ 的所有元素,并且是非零的首一多项式.记 $d_1(\lambda) = b_s(\lambda)$,显然此时可对 $\boldsymbol{B}_s(\lambda)$ 做一系列初等变换,将其第一行和第一列除左上角元素 $d_1(\lambda)$ 外全变

成零，即

$$\boldsymbol{B}_s(\lambda)\sim\begin{bmatrix}d_1(\lambda) & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1(\lambda)\end{bmatrix}$$

因为 $(m-1)\times(n-1)$ 阶矩阵 $\boldsymbol{A}_1(\lambda)$ 的元素是 $\boldsymbol{B}_s(\lambda)$ 的元素的组合，而 $b_s(\lambda)$ 即 $d_1(\lambda)$ 可以整除 $\boldsymbol{B}_s(\lambda)$ 的所有元素，因此 $d_1(\lambda)$ 能整除 $\boldsymbol{A}_1(\lambda)$ 的所有元素.

如果 $\boldsymbol{A}_1(\lambda)\neq\boldsymbol{O}$，则对 $\boldsymbol{A}_1(\lambda)$ 重复上述过程，可得

$$\boldsymbol{B}_s(\lambda)\sim\begin{bmatrix}d_1(\lambda) & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{A}_1(\lambda)\end{bmatrix}\sim\begin{bmatrix}d_1(\lambda) & & \\ & d_2(\lambda) & \\ & & \boldsymbol{A}_2(\lambda)\end{bmatrix}$$

其中，$d_1(\lambda)$ 和 $d_2(\lambda)$ 都是首一多项式，并且 $d_1(\lambda)\mid d_2(\lambda)$，而且 $d_2(\lambda)$ 能整除 $\boldsymbol{A}_2(\lambda)$ 的所有元素. 继续上述过程，$\boldsymbol{A}(\lambda)$ 最终化成了与之等价的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$. 证毕.

例 6.4.4 求 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)=\begin{bmatrix}0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ \lambda & 0 & \lambda+1\\ 0 & 0 & -\lambda+2\end{bmatrix}$ 的 Smith 标准型.

解：对矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 进行初等变换，可得

$$\boldsymbol{A}(\lambda)=\begin{bmatrix}0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ \lambda & 0 & \lambda+1\\ 0 & 0 & -\lambda+2\end{bmatrix}\overset{r_{12}}{\sim}\begin{bmatrix}\lambda & 0 & \lambda+1\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ 0 & 0 & -\lambda+2\end{bmatrix}\overset{c_{13}(-1)}{\sim}\begin{bmatrix}\lambda & 0 & 1\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ 0 & 0 & -\lambda+2\end{bmatrix}$$

$$\overset{c_{13}}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & \lambda\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ -\lambda+2 & 0 & 0\end{bmatrix}\overset{r_{13}(\lambda-2)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & \lambda\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-2)\end{bmatrix}\quad\text{（不是标准型！）}$$

$$\overset{c_{13}(-\lambda)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & 0\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-2)\end{bmatrix}\overset{r_{32}(1)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & \lambda(\lambda-2)\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-2)\end{bmatrix}$$

$$\overset{c_{23}(-1)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda(\lambda-1) & -\lambda\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-2)\end{bmatrix}\overset{c_{23}}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\lambda & \lambda(\lambda-1)\\ 0 & \lambda(\lambda-2) & 0\end{bmatrix}$$

$$\overset{r_{23}(\lambda-2)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\lambda & \lambda(\lambda-1)\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\end{bmatrix}\overset{c_{23}(\lambda-1)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\lambda & 0\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\end{bmatrix}$$

$$\overset{r_2(-1)}{\sim}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda & 0\\ 0 & 0 & \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\end{bmatrix}=J(\lambda)$$

定义 6.4.14　λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 中的非零元 $d_1(\lambda), d_2(\lambda), \cdots, d_r(\lambda)$ 称为 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的**不变因子**(invariant factor).

这说明我们可以先求 Smith 标准型,再来确定不变因子. 比如例 6.4.4 中的不变因子就是 $1, \lambda$ 和 $\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)$.

为了确定 Smith 标准型的唯一性,我们需要研究 λ 矩阵的秩和行列式因子.

定义 6.4.15　λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 中不为零的子行列式(即子式)的最高阶数 r 称为 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的**秩**,记为 $r(\boldsymbol{A}(\lambda))$. 零矩阵的秩规定为零. 秩 $r(\boldsymbol{A}(\lambda))=n$ 的 n 阶方阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 称为**满秩阵**或**非奇异阵**.

定义 6.4.16　λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的所有非零 k 阶子式的首一最大公因式称为 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 k **阶行列式因子**(determinantal divisor),记为 $D_k(\lambda)$.

注意不要将矩阵的行列式因子与子式混淆.

例 6.4.5　$\boldsymbol{A}(\lambda)=\begin{pmatrix}\lambda & 1\\ 0 & \lambda\end{pmatrix}$ 的秩为 2, $\boldsymbol{B}(\lambda)=\begin{pmatrix}1 & 1\\ -\lambda & \lambda\end{pmatrix}$ 的秩也是 2, $\boldsymbol{C}(\lambda)=\begin{pmatrix}\lambda & \lambda-1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$ 的秩是 1.

$\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 $D_1(\lambda)=1, D_2(\lambda)=\lambda^2$, $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 的 $D_1(\lambda)=1, D_2(\lambda)=\lambda$, 至于 $\boldsymbol{C}(\lambda)$, $D_1(\lambda)=D_2(\lambda)=1$.

可以证明,初等变换不改变 λ 矩阵的秩,即等价的 λ 矩阵必等秩;反之,等秩的矩阵未必等价. 例如,此例中的 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 尽管秩相等,却不等价,因为前面已指出,等价的 λ 矩阵的行列式只能相差一个常数因子,而矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 不满足这个要求.

既然初等变换不改变 λ 矩阵的秩,那么从矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 可知 $r(\boldsymbol{A}(\lambda))$ 就是 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 中非零元的个数.

定理 6.4.12　等价的 λ 矩阵具有相同的各级行列式因子.

证明:略.

定理 6.4.13　矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 是唯一的,并且

$$d_1(\lambda)=D_1(\lambda),\quad d_k(\lambda)=\frac{D_k(\lambda)}{D_{k-1}(\lambda)}\quad (k=2,3,\cdots,r)$$

其中, $r=r(\boldsymbol{A}(\lambda))$.

证明:计算可知 $D_1(\lambda)=d_1(\lambda), D_2(\lambda)=d_1(\lambda)d_2(\lambda), \cdots, D_r(\lambda)=d_1(\lambda)d_2(\lambda)\cdots d_r(\lambda)$, 此即

$$d_1(\lambda)=D_1(\lambda),\ d_2(\lambda)=\frac{D_2(\lambda)}{D_1(\lambda)},\ \cdots,\ d_r(\lambda)=\frac{D_r(\lambda)}{D_{r-1}(\lambda)}$$

这说明 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变因子由 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的行列式因子唯一确定,因此 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 是唯一的. 证毕.

这个定理说明我们也可以用行列式因子来确定不变因子,从而得到唯一的 Smith 标准型. 但行列式因子的计算复杂,所以在这次较量中,通过初等变换求 Smith 标准型显然"胜出". 回顾线性代数中求常数矩阵的秩时,初等变换法也比定义法简便得多,这再次说明"变换是王道".

另外,这个定理也意味着当矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 为满秩方阵时,由于 $\boldsymbol{A}(\lambda)\sim\boldsymbol{J}(\lambda)$, 从而存在非

零常数 c，使得 $|\boldsymbol{A}(\lambda)| = c|\boldsymbol{J}(\lambda)| = cd_1(\lambda)d_2(\lambda)\cdots d_n(\lambda)$，即每个不变因子 $d_k(\lambda)$ 都是行列式 $|\boldsymbol{A}(\lambda)|$ 的因子，而且是 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变量，这也正是其名称的由来.

定理 6.4.14 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 等价的充要条件是它们有相同的行列式因子(或相同的不变因子).

证明:略.

在例 6.4.4 中，不变因子 $d_3(\lambda) = \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)$ 可被分解为三个一次因式的乘积，这些一次因式起什么作用呢?

定义 6.4.17 将矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的每个非常数的不变因子分解为互不相同的一次因式方幂的乘积，所有不变因子的这些一次因式的方幂(相同的按出现的次数计算)称为 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的**初等因子**(elementary divisor).

例如，在例 6.4.4 中，$\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变因子为 $d_1(\lambda) = 1, d_2(\lambda) = \lambda, d_3(\lambda) = \lambda(\lambda-1)(\lambda-2)$，因此 $A(\lambda)$ 的初等因子为来自 $d_2(\lambda)$ 的 λ 以及来自 $d_3(\lambda)$ 的 $\lambda, \lambda-1, \lambda-2$，也就是 $\lambda, \lambda, \lambda-1, \lambda-2$.

例 6.4.6 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变因子为

$$d_1(\lambda) = 1, d_2(\lambda) = \lambda(\lambda-1), d_3(\lambda) = \lambda(\lambda-1)^2(\lambda+1)^2$$

$$d_4(\lambda) = \lambda^2(\lambda-1)^3(\lambda+1)^3(\lambda-2)$$

则 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的所有初等因子为 $\lambda, \lambda-1; \lambda, (\lambda-1)^2, (\lambda+1)^2; \lambda^2, (\lambda-1)^3, (\lambda+1)^3, \lambda-2$.

初等因子来自不变因子，如果知道矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的所有初等因子，能否反过来确定相应的不变因子? 等价矩阵的初等因子是否相同呢?

遗憾地是，仅凭初等因子不能唯一地确定不变因子. 例如下面的两个矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 的初等因子相同，但不变因子不相同，两者也不等价，因为它们的秩不相等:

$$\boldsymbol{A}(\lambda) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda-2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda-2)^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda-2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda-2)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

等价矩阵的初等因子显然相同，但反之未必成立. 那么再补上什么条件就能够反过来确定相应的不变因子? 考虑到等价矩阵的秩也相等，反过来秩相等的矩阵也未必等价. 如此"同病相怜"的两个条件合在一起后，情况又如何呢?

定理 6.4.15 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 等价的充要条件是它们有相同的初等因子，并且秩相等.

显然，矩阵的秩确定了不变因子的个数. 同时，结合例 6.4.6 可知，同一个一次因式(比如 $\lambda-1$)的方幂做成的初等因子中，方次最高的必在 $d_r(\lambda)$ 的分解式中[比如 $(\lambda-1)^3$ 出现在 $d_3(\lambda)$ 中]，方次次高的出现在 $d_{r-1}(\lambda)$ 的分解式中(比如 $(\lambda-1)^2$ 出现在 $d_2(\lambda)$ 中)，以此类推(比如剩下的一个 $(\lambda-1)^1$ 出现在 $d_2(\lambda)$ 中)，可知属于同一个一次因式的方幂的初等因子在不变因子的分解式中出现的位置是唯一确定的.

关于等价矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 与其各种因子之间的关系，如图 6-9 所示. 图中 $d_k^A(\lambda)$、$D_k^A(\lambda)$ 及 $e^A(\lambda)$ 分别表示 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变因子、行列式因子和初等因子，$d_k^B(\lambda)$，$D_k^B(\lambda)$ 及 $e^B(\lambda)$ 分别表示 $\boldsymbol{B}(\lambda)$ 的不变因子、行列式因子和初等因子.

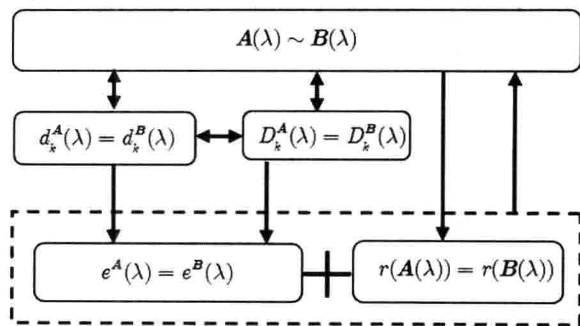


图 6-9　等价矩阵与其各种因子之间的关系

例 6.4.7　求 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型，其中

$$\boldsymbol{A}(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda-a & -1 & 0 \\ 0 & \lambda-a & -1 \\ 0 & 0 & \lambda-a \end{bmatrix} = \lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{J}_3(a), \boldsymbol{J}_3(a) = \begin{bmatrix} a & -1 & 0 \\ 0 & a & -1 \\ 0 & 0 & a \end{bmatrix}$$

解：
$$\boldsymbol{A}(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda-a & -1 & 0 \\ 0 & \lambda-a & -1 \\ 0 & 0 & \lambda-a \end{bmatrix} \overset{c_{12}}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & \lambda-a & 0 \\ \lambda-a & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \lambda-a \end{bmatrix}$$

$$\overset{r_{12}(\lambda-a)}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & \lambda-a & 0 \\ 0 & (\lambda-a)^2 & -1 \\ 0 & 0 & \lambda-a \end{bmatrix} \overset{c_{12}(\lambda-a)}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & (\lambda-a)^2 & -1 \\ 0 & 0 & \lambda-a \end{bmatrix}$$

$$\overset{c_{23}}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & (\lambda-a)^2 \\ 0 & \lambda-a & 0 \end{bmatrix} \overset{r_{23}(\lambda-a)}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & (\lambda-a)^2 \\ 0 & 0 & (\lambda-a)^3 \end{bmatrix}$$

$$\overset{c_{23}((\lambda-a)^2)}{\sim} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda-a)^3 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (\lambda-a)^3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{J}(\lambda)$$

此例中 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的不变因子为 $d_1(\lambda) = d_2(\lambda) = 1, d_3(\lambda) = (\lambda-a)^3$，则初等因子为 $(\lambda-a)^3$. 如果还知道 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的秩为 3，则可反过来确定 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的三个不变因子，进而可确定 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型 $\boldsymbol{J}(\lambda)$，因此也可唯一确定相应的 Jordan 块，即

$$(\lambda-a)^3 \leftrightarrow \lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{J}_3(a) \leftrightarrow \boldsymbol{J}_3(a).$$

一般地，借助于特征矩阵 $\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{J}_n(a)$ 这个媒介，可将初等因子 $(\lambda-a)^n$ 与 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_n(a)$ 一一对应起来.

例 6.4.8　求 Frobenius 标准型 $\boldsymbol{C}_2$ 的特征矩阵 $\lambda I - \boldsymbol{C}_2$ 的 Smith 标准型.

解： 设 $\boldsymbol{C}_2$ 的特征多项式为 $\varphi(\lambda) = |\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{C}_2| = \lambda^n - p_{n-1}\lambda^{n-1} - \cdots - p_1\lambda - p_0 = 0.$

先对特征矩阵 $\lambda I - C_2$ 依次执行变换 $r_{21}(\lambda), r_{31}(\lambda^2), \cdots, r_{n1}(\lambda^{n-1})$，再依次执行 r_{12}, $r_{23}, \cdots, r_{n-1,n}$ 将第一行轮换为最后一行，即

$$\lambda I - C_2 \sim \begin{pmatrix} 0 & & & & \varphi(\lambda) \\ -1 & \lambda & & & -p_1 \\ & -1 & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \lambda & -p_{n-2} \\ & & & -1 & \lambda - p_{n-1} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -1 & \lambda & & & -p_1 \\ & -1 & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \lambda & -p_{n-2} \\ & & & -1 & \lambda - p_{n-1} \\ & & & & \varphi(\lambda) \end{pmatrix}$$

接着，依次执行 $c_{12}(\lambda), c_{23}(\lambda), \cdots, c_{n-1,n}(\lambda)$ 以及其他列变换，可得

$$\lambda I - C_2 \sim \begin{pmatrix} -1 & & & & -p_1 \\ & -1 & & & \vdots \\ & & \ddots & & -p_{n-2} \\ & & & -1 & \lambda - p_{n-1} \\ & & & & \varphi(\lambda) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \varphi(\lambda) \end{pmatrix}$$

因此所求 Smith 标准型是对角矩阵 $\mathrm{diag}(1, 1, \cdots, 1, \varphi(\lambda))$

考虑到常数矩阵 A 的 Jordan 标准型 J_A 是准对角矩阵，因此我们还必须考虑准对角 λ 矩阵的初等因子与其各对角子块的初等因子的关系.

定理 6.4.16 矩阵 $A(\lambda) = \begin{pmatrix} B(\lambda) & \\ & C(\lambda) \end{pmatrix}$ 的全部初等因子就是 $B(\lambda)$ 和 $C(\lambda)$ 的初等因子的全体. 特别地，当 $B(\lambda)$ 和 $C(\lambda)$ 分别退化为多项式 $b(\lambda)$ 和 $c(\lambda)$ 时，$A(\lambda)$ 的全部初等因子就是 $b(\lambda)$ 和 $c(\lambda)$ 的所有一次因式的幂积.

证明：略.

6.4.3 Smith 标准型的应用

前面我们已看到，寻找与常数矩阵 A 相似的 Jordan 标准型 J_A 的问题，已转化成了求其特征矩阵 $\lambda I - A$ 的 Smith 标准型. 更一般地，常数矩阵的相似可以归结为特征矩阵的相似.

定理 6.4.17 矩阵 A 与 B 相似的充要条件是它们的特征矩阵 $\lambda I - A$ 与 $\lambda I - B$ 等价.

证明：我们只给出必要性的证明. 充分性的证明请查阅相关文献.

若 $A \backsim B$，则存在可逆矩阵 P，使得 $P^{-1}AP = B$，从而 $P^{-1}(\lambda I - A)P = \lambda I - B$，由于 P^{-1}, P 都是可逆矩阵，因此 $\lambda I - A \sim \lambda I - B$. 证毕.

定义 6.4.18 分别称 n 阶矩阵 A 的特征矩阵 $\lambda I - A$ 的行列式因子、不变因子和初等因子为矩阵 A 的行列式因子、不变因子和初等因子.

定理 6.4.18 矩阵 A 与 B 相似的充要条件是它们有相同的行列式因子(或不变因子).

证明：结合定理 6.4.17 与定理 6.4.15 即可. 证毕.

定理 6.4.19 复数域上两个矩阵 A 与 B 相似的充要条件是它们有相同的初等因子.

证明: 注意到 $r(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=r(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})=n$，再结合定理 6.4.17 与定理 6.4.14 即可. 证毕.

关于相似矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 与其各种因子之间的关系，如图 6-10 所示. 图中 $\boldsymbol{S}(\lambda)=\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{T}(\lambda)=\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}$ 分别表示 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的特征矩阵，$d_k^S(\lambda)$，$D_k^S(\lambda)$ 及 $e^S(\lambda)$ 分别表示特征矩阵 $\boldsymbol{S}(\lambda)$ 的不变因子、行列式因子和初等因子，即 $\boldsymbol{A}$ 的不变因子、行列式因子和初等因子，$d_k^T(\lambda)$、$D_k^T(\lambda)$ 及 $e^T(\lambda)$ 分别表示矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的不变因子、行列式因子和初等因子，条件 $r(\boldsymbol{S}(\lambda))=r(\boldsymbol{T}(\lambda))=n$ 是显然的.

设 $\boldsymbol{J}_A$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型. 根据定理 6.4.16 可知，$\boldsymbol{J}_A$ 的所有初等因子是由其全部 Jordan 块的初等因子组成的. 前面又已指出每个 Jordan 块与一个初等因子一一对应，因此一旦确定 $\boldsymbol{J}_A$ 的全部初等因子，就能唯一确定 $\boldsymbol{J}_A$（不考虑 Jordan 块的排列顺序）. 由于 $\boldsymbol{A}\simeq \boldsymbol{J}_A$，$\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\sim \boldsymbol{J}(\lambda)$，根据定理 6.4.19、定理 6.4.15 及定义 6.4.18，问题就转化为通过特征矩阵 $\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 的 Smith 标准型来确定 $\boldsymbol{A}$ 的初等因子，进而确定 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型.

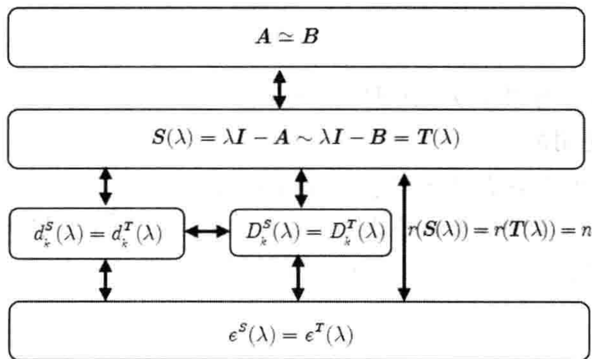


图 6-10 相似矩阵与其各种因子之间的关系

例 6.4.9 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}_A$，其中 $\boldsymbol{A}$ 同例 2.5.1.

解: 初等因子法.

对特征矩阵 $\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 进行初等变换，则（请读者自行补上所用的初等变换）

$$\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\lambda+1 & -1 & 0\\ 4 & \lambda-3 & 0\\ -1 & 0 & \lambda-2\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}-1 & \lambda+1 & 0\\ \lambda-3 & 4 & 0\\ 0 & -1 & \lambda-2\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ \lambda-3 & (\lambda-1)^2 & 0\\ 0 & -1 & \lambda-2\end{pmatrix}$$

$$\sim\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & (\lambda-1)^2 & 0\\ 0 & -1 & \lambda-2\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & (\lambda-1)^2 & (\lambda-2)(\lambda-1)^2\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}$$

$$\sim\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & (\lambda-2)(\lambda-1)^2\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & (\lambda-2)(\lambda-1)^2\end{pmatrix}=\boldsymbol{J}(\lambda)$$

由 $\boldsymbol{J}(\lambda)$ 可知 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的初等因子为 $\lambda-2,(\lambda-1)^2$. 从而所求的 Jordan 标准型为

$$\boldsymbol{J}_A=\begin{pmatrix}2&0&0\\0&1&1\\0&0&1\end{pmatrix}$$

与例 2.5.1 比较可知,初等因子法的优点是不必求出 Jordan 变换矩阵 $\boldsymbol{P}$. 当然,在需要求出 $\boldsymbol{P}$ 的场合,显然不能使用初等因子法.

最后,我们再来解决 2.6.3 小节末尾的“误打误撞”问题,给出最小多项式的生成机制.

定理 6.4.20　矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式 $m(\lambda)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最后一个不变因子 $d_n(\lambda)$,即若

$$\varphi(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=(\lambda-\lambda_1)^{m_1}\cdots(\lambda-\lambda_s)^{m_s}$$

则 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式为

$$m(\lambda)=(\lambda-\lambda_1)^{d_1}\cdots(\lambda-\lambda_s)^{d_s}$$

这里 d_i 为 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型 $\boldsymbol{J}_A$ 中包含 λ_i 的最大 Jordan 块的阶数,即特征值 λ_i 的指标.

例 6.4.10　使用最小多项式 $m(\lambda)$ 重解例 2.6.3.

解法三:基于最小多项式的 Cayley-Hamilton 法.

由例 6.4.9 可知,$\boldsymbol{A}$ 的最小多项式为 $m(\lambda)=d_3(\lambda)=(\lambda-1)^2(\lambda-2)$. 而矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})$ 对应的多项式为 $f(\lambda)=\lambda^5-4\lambda^4+6\lambda^3-6\lambda^2+6\lambda-3$,由于 $f(\lambda)=(\lambda^2+1)m(\lambda)+\lambda-1$,所以

$$f(\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{A}^2+\boldsymbol{I})m(\boldsymbol{A})+\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix}-2&1&0\\-4&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}$$

6.5　矩阵函数及其计算

矩阵函数在力学、控制理论及信号处理等学科中具有重要应用. 类比普通函数,矩阵函数的特殊之处在于其自变量与因变量都是方阵. 对应于矩阵函数的多种表示方式(幂级数表示、Jordan 标准型表示、多项式表示、积分表示等),定义矩阵函数的方式也很多.

6.5.1　矩阵函数的定义及性质

在第 2 章,借助于 Jordan 分解,我们将 $\boldsymbol{A}^n$ 的计算转化为 $\boldsymbol{J}^n$ 的计算,即将矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^n$ 的计算转化为矩阵函数 $f(\boldsymbol{J})=\boldsymbol{J}^n$ 的计算. 这个想法可以极大地推广到更多的矩阵函数.

引理 6.5.1　设一元复变量函数 $f(z)$ 可展开为收敛半径为 R 的幂级数,即

$$f(z)=\sum_{k=0}^{\infty}c_kz^k,\quad |z|<R$$

将 n 阶 Jordan 块 $\boldsymbol{J}_n(\lambda)$ 简记为 $\boldsymbol{J}$. 若谱半径 $\rho(\boldsymbol{J})<R$, 则矩阵幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty} c_k\boldsymbol{J}^k$ 收敛,其和为

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{J}^k = \begin{pmatrix} f(\lambda) & \frac{1}{1!}f'(\lambda) & \cdots & \frac{1}{(n-1)!}f^{(n-1)}(\lambda) \\ & f(\lambda) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \frac{1}{1!}f'(\lambda) \\ & & & f(\lambda) \end{pmatrix} \tag{6.5.1}$$

证明:令 $\boldsymbol{S}_m=\sum\limits_{k=0}^{m} c_k\boldsymbol{J}^k$, $\boldsymbol{S}_m(\lambda)=\sum\limits_{k=0}^{m} c_k\lambda^k$. 由式 (2.6.6) 可知

$$\boldsymbol{S}_m = \begin{pmatrix} \sum\limits_{k=0}^{m} c_k\lambda^k & \sum\limits_{k=0}^{m} c_k C_k^1\lambda^{k-1} & \cdots & \sum\limits_{k=0}^{m} c_k C_k^{n-1}\lambda^{k-(n-1)} \\ & \sum\limits_{k=0}^{m} c_k\lambda^k & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \sum\limits_{k=0}^{m} c_k C_k^1\lambda^{k-1} \\ & & & \sum\limits_{k=0}^{m} c_k\lambda^k \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \boldsymbol{S}_m(\lambda) & \boldsymbol{S}'_m(\lambda) & \cdots & \frac{1}{(n-1)!}\boldsymbol{S}_m^{(n-1)}(\lambda) \\ & \boldsymbol{S}_m(\lambda) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \boldsymbol{S}'_m(\lambda) \\ & & & \boldsymbol{S}_m(\lambda) \end{pmatrix}$$

其中, $l>k$ 时规定 $C_k^l=0$.

因为函数 $\boldsymbol{S}_m(t)=\sum\limits_{k=0}^{m} c_k t^k$ 的收敛半径为 R, 且 $|\lambda|<R$, 因此 $\boldsymbol{S}_m(\lambda), \boldsymbol{S}'_m(\lambda), \cdots, \boldsymbol{S}_m^{(n-1)}(\lambda)$ 都收敛,且 $\boldsymbol{S}_m(\lambda)=f(\lambda), \boldsymbol{S}'_m(\lambda)=f'(\lambda), \cdots, \boldsymbol{S}_m^{(n-1)}(\lambda)=f^{(n-1)}(\lambda)$. 从而

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \boldsymbol{J}^k = \lim_{m\to\infty}\boldsymbol{S}_m \begin{pmatrix} f(\lambda) & \frac{1}{1!}f'(\lambda) & \cdots & \frac{1}{(n-1)!}f^{(n-1)}(\lambda) \\ & f(\lambda) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \frac{1}{1!}f'(\lambda) \\ & & & f(\lambda) \end{pmatrix}$$

证毕.

定义 6.5.1 称式(6.5.1)为 Jordan 块 $\boldsymbol{J}$ 的矩阵函数(matrix function),记为 $f(\boldsymbol{J})$,即

$$f(\boldsymbol{J})=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{J}^k$$

定理 6.5.2 (**Lagrange-Sylvester 定理**)设 $f(z)=\sum_{k=0}^{\infty}c_kz^k$,且 $f(z)$ 的收敛半径为 R. 设方阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$,这里 $\boldsymbol{J}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_1,\boldsymbol{J}_2,\cdots,\boldsymbol{J}_s)$. 若谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})<R$,则矩阵幂级数 $\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{A}^k$ 收敛,其和为

$$\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{A}^k=\boldsymbol{P}\cdot\mathrm{diag}(f(\boldsymbol{J}_1),f(\boldsymbol{J}_2),\cdots,f(\boldsymbol{J}_s))\cdot\boldsymbol{P}^{-1}\tag{6.5.2}$$

其中

$$f(\boldsymbol{J}_i)=\begin{pmatrix}f(\lambda_i) & \frac{1}{1!}f'(\lambda_i) & \cdots & \frac{1}{(m_i-1)!}f^{(m_i-1)}(\lambda_i)\\ & f(\lambda_i) & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & \frac{1}{1!}f'(\lambda_i)\\ & & & f(\lambda_i)\end{pmatrix}\tag{6.5.3}$$

证明:
$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{A}^k&=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{PJ}^k\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}\Big(\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{J}^k\Big)\boldsymbol{P}^{-1}\\&=\boldsymbol{P}\Big[\mathrm{diag}\Big(\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{J}_1^k,\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{J}_2^k,\cdots,\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{J}_s^k\Big)\Big]\boldsymbol{P}^{-1}\\&=\boldsymbol{P}\cdot\mathrm{diag}(f(\boldsymbol{J}_1),f(\boldsymbol{J}_2),\cdots,f(\boldsymbol{J}_s))\cdot\boldsymbol{P}^{-1}\end{aligned}$$

证毕.

定义 6.5.2 称式(6.5.2)为方阵 $\boldsymbol{A}$ 的**矩阵函数**,记为 $f(\boldsymbol{A})$,即 $f(\boldsymbol{A})=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\boldsymbol{A}^k$.

在微积分和复变函数中,已经证明下列幂级数展开式:

$$\mathrm{e}^z=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^k}{k!},\ R=+\infty$$

$$\sin z=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}z^{2k+1},\ R=+\infty$$

$$\cos z=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}z^{2k},\ R=+\infty$$

$$(1-z)^{-1}=\sum_{k=0}^{\infty}z^k,\ R=1$$

$$\ln(1+z)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k+1}z^{k+1},\ R=1$$

相应地，对任意 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，按照 Lagrange-Sylvester 定理，我们有如下矩阵函数：

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\boldsymbol{A}^k}{k!}$$

$$\sin\boldsymbol{A}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\boldsymbol{A}^{2k+1}$$

$$\cos\boldsymbol{A}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}\boldsymbol{A}^{2k}$$

$$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})^{-1}=\sum_{k=0}^{\infty}\boldsymbol{A}^k,\ \rho(\boldsymbol{A})<1$$

$$\ln(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k+1}\boldsymbol{A}^{k+1},\ \rho(\boldsymbol{A})<1$$

以及**含参矩阵函数**(定义见 6.6.1 小节)：

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}\boldsymbol{A}^k$$

$$\sin(\boldsymbol{A}t)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}t^{2k+1}\boldsymbol{A}^{2k+1}$$

$$\cos(\boldsymbol{A}t)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k)!}t^{2k}\boldsymbol{A}^{2k}$$

其中，$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$，$\sin\boldsymbol{A}$，$\cos\boldsymbol{A}$ 分别被称为方阵 $\boldsymbol{A}$ 的**矩阵指数函数、矩阵正弦函数和矩阵余弦函数**.

根据欧拉公式 $\mathrm{e}^{j\theta}=\cos\theta+j\sin\theta$，这里 $j=\sqrt{-1}$，还可以推出：

$$\mathrm{e}^{j\boldsymbol{A}}=\cos\boldsymbol{A}+j\sin\boldsymbol{A}$$

$$\cos\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{j\boldsymbol{A}}+\mathrm{e}^{-j\boldsymbol{A}})$$

$$\sin\boldsymbol{A}=\frac{1}{2j}(\mathrm{e}^{j\boldsymbol{A}}-\mathrm{e}^{-j\boldsymbol{A}})$$

$$\cos(-\boldsymbol{A})=\cos\boldsymbol{A}$$

$$\sin(-\boldsymbol{A})=-\sin\boldsymbol{A}$$

我们给出欧拉公式的证明如下：

$$\mathrm{e}^{j\boldsymbol{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{j^k}{k!}\boldsymbol{A}^k=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{j^{2k}}{(2k)!}\boldsymbol{A}^{2k}+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{j^{2k+1}}{(2k+1)!}\boldsymbol{A}^{2k+1}$$

$$=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^{2k}}{(2k)!}\boldsymbol{A}^{2k}+j\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^{2k}}{(2k+1)!}\boldsymbol{A}^{2k+1}=\cos\boldsymbol{A}+j\sin\boldsymbol{A}$$

定理 6.5.3　设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{J}\boldsymbol{P}^{-1}$，则

(1) $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{P}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\boldsymbol{P}^{-1}$；(2) $\det\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\mathrm{e}^{(\mathrm{tr}\boldsymbol{A})t}$.

证明：(1) $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}\boldsymbol{A}^k=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}\boldsymbol{P}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}})^k\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}\left[\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^k}{k!}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}})^k\right]\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\boldsymbol{P}^{-1}$

(2) $\det\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\det\boldsymbol{P}\cdot\det\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\cdot\det\boldsymbol{P}^{-1}$

$$= \det e^{Jt} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & \times & \cdots & \times \\ & e^{\lambda_2 t} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \times \\ & & & e^{\lambda_n t} \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^{n} e^{\lambda_i t} = e^{\sum_{i=1}^{n}\lambda_i t} = e^{(\mathrm{tr}\boldsymbol{A})t}$$

我们看到微积分中的一些性质被平行地推广到矩阵函数. 但令人遗憾的是,指数运算规则 $e^{\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{B}} = e^{\boldsymbol{B}}e^{\boldsymbol{A}} = e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}}$ 一般不成立.

例如,当 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 时,显然 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}^2 = \boldsymbol{B}, (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^2 = \boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$, 因此

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{A}} &= \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{A} + \cdots + \frac{1}{k!}\boldsymbol{A} + \cdots = \boldsymbol{I} + \left(1 + \frac{1}{2!} + \cdots + \frac{1}{k!} + \cdots\right)\boldsymbol{A} \\ &= \boldsymbol{I} + (e-1)\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} e & e-1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$e^{\boldsymbol{B}} = I + (e-1)\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} e & 1-e \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}} &= \boldsymbol{I} + (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \frac{1}{2!}2(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \cdots + \frac{1}{k!}2^{k-1}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \cdots \\ &= \boldsymbol{I} + \frac{1}{2}(e^2-1)(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \begin{pmatrix} e^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

验算可知 $e^{\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{B}}, e^{\boldsymbol{B}}e^{\boldsymbol{A}}, e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}}$ 确实两两不等.

我们自然会进一步追问,什么条件下指数运算规则成立呢?

定理 6.5.4 设 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$, 则

(1) $e^{\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{B}} = e^{\boldsymbol{B}}e^{\boldsymbol{A}} = e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}}$; (2) $e^{\boldsymbol{A}t}e^{\boldsymbol{B}t} = e^{\boldsymbol{B}t}e^{\boldsymbol{A}t} = e^{(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t}$.

证明: 只证结论(1).

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{B}} &= \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^2 + \cdots\right)\left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{B} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{B}^2 + \cdots\right) \\ &= \boldsymbol{I} + (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) + \frac{1}{2!}(\boldsymbol{A}^2 + \boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA} + \boldsymbol{B}^2) + \cdots = e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}} \end{aligned}$$

另外,注意到 $e^{\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}} = e^{\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}} = e^{\boldsymbol{B}}e^{\boldsymbol{A}}$, 因此结论成立. 证毕.

当 $\boldsymbol{A}$ 可逆时,显然 $e^{\boldsymbol{A}}e^{-\boldsymbol{A}} = e^{-\boldsymbol{A}}e^{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I}$, 即 $(e^{\boldsymbol{A}})^{-1} = e^{-\boldsymbol{A}}$. 类似地, $(e^{\boldsymbol{A}t})^{-1} = e^{-\boldsymbol{A}t}$. 另外,当 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$ 时,显然有 $(e^{\boldsymbol{A}})^2 = e^{2\boldsymbol{A}}$. 一般地,对任意 $k \in \mathbb{Z}$, 可知 $(e^{\boldsymbol{A}})^k = e^{k\boldsymbol{A}}$ (k 为负数时假定 $\boldsymbol{A}$ 可逆). 类似地 $(e^{\boldsymbol{A}t})^k = e^{(kt)\boldsymbol{A}}$ (k 为负数时假定 $\boldsymbol{A}$ 可逆).

定理 6.5.5 如果 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$, 证明:

(1) $\cos(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \cos\boldsymbol{A}\cos\boldsymbol{B} - \sin\boldsymbol{A}\sin\boldsymbol{B}$; (2) $\sin(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \sin\boldsymbol{A}\cos\boldsymbol{B} + \cos\boldsymbol{A}\sin\boldsymbol{B}$.

证明: 只证结论(1). 结论(2)留作练习.

$$\begin{aligned} &\cos\boldsymbol{A}\cos\boldsymbol{B} - \sin\boldsymbol{A}\sin\boldsymbol{B} \\ &= \frac{1}{2}(e^{j\boldsymbol{A}} + e^{-j\boldsymbol{A}}) \cdot \frac{1}{2}(e^{j\boldsymbol{B}} + e^{-j\boldsymbol{B}}) - \frac{1}{2j}(e^{j\boldsymbol{A}} - e^{-j\boldsymbol{A}}) \cdot \frac{1}{2j}(e^{j\boldsymbol{B}} - e^{-j\boldsymbol{B}}) \\ &= \frac{1}{4}[e^{j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})} + e^{-j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})} + e^{j(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})} + e^{-j(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})}] + \frac{1}{4}[e^{j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})} + e^{-j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})} - e^{j(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})} - e^{-j(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})}] \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}(e^{j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})} + e^{-j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}) = \cos(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})$$

证毕.

特别地,由定理 6.5.5 可知 $\cos(2\boldsymbol{A}) = \cos^2\boldsymbol{A} - \sin^2\boldsymbol{A}$, $\sin(2\boldsymbol{A}) = 2\sin\boldsymbol{A}\cos\boldsymbol{A}$.

6.5.2 矩阵函数的计算

前面我们结合矩阵函数的定义和已有关系式,解决了一些矩阵函数关系式的证明. 按照定义,矩阵函数的计算被归结为矩阵幂级数求和,其中占据核心地位的是矩阵高次幂的计算. 如果各次方幂之间存在特殊的关系,显然计算就能得到极大的简化. 这就是递推公式法的想法.

一、递推公式法

计算原理　通过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式或最小多项式,或者通过其他途径,得到矩阵方幂之间的递推关系式,代入相应的矩阵幂级数,从而将矩阵函数的计算转化为数项级数求和问题.

例 6.5.1　设 $\boldsymbol{y}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 中的单位向量,令 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$, 求 $e^{\boldsymbol{B}}$.

解:注意到 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 1$, 显然可知

$\boldsymbol{B}^2 = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})^2 = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} + (\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}$,
所以 $\boldsymbol{B}^n = \boldsymbol{B}\ (n \geqslant 2)$, 从而

$$e^{\boldsymbol{B}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\boldsymbol{B}^n}{n!} = \boldsymbol{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\boldsymbol{B}^n}{n!} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} = \boldsymbol{I} + (e-1)\boldsymbol{B}$$

例 6.5.2　设 4 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\pi, -\pi, 0, 0$, 求 $\sin\boldsymbol{A}$.

解:由题可知, $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为

$$\varphi(\lambda) = \lambda^2(\lambda - \pi)(\lambda + \pi) = \lambda^4 - \pi^2\lambda^2$$

因此由 Cayley-Hamilton 定理可知

$$\boldsymbol{O} = \varphi(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}^4 - \pi^2\boldsymbol{A}^2$$

因此

$$\boldsymbol{A}^4 = \pi^2\boldsymbol{A}^2, \boldsymbol{A}^5 = \pi^2\boldsymbol{A}^3, \boldsymbol{A}^6 = \pi^2\boldsymbol{A}^4 = \pi^2 \cdot \pi^2\boldsymbol{A}^2 = \pi^4\boldsymbol{A}^2, \boldsymbol{A}^7 = \boldsymbol{A}^6\boldsymbol{A} = \pi^4\boldsymbol{A}^3, \cdots$$

一般地

$$\boldsymbol{A}^{2k} = \pi^{2k-2}\boldsymbol{A}^2,\quad \boldsymbol{A}^{2k+1} = \pi^{2k-2}\boldsymbol{A}^3 \quad (k = 2, 3, \cdots)$$

从而

$$\begin{aligned}\sin\boldsymbol{A} &= \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\boldsymbol{A}^{2k+1} = \boldsymbol{A} + \sum_{k=1}^{n} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\pi^{2k-2}\boldsymbol{A}^3 \\ &= \boldsymbol{A} + \frac{1}{\pi^3}\boldsymbol{A}^3 \sum_{k=1}^{n} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\pi^{2k+1} \\ &= \boldsymbol{A} + \pi^{-3}(\sin\pi - \pi)\boldsymbol{A}^3 = \boldsymbol{A} - \pi^{-2}\boldsymbol{A}^3\end{aligned}$$

递推公式法只适用于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的递推关系式不太复杂的情形. 例如,对下面例 6.5.3 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$,尽管矩阵只有 2 阶,只存在 2 项递推关系式 $\boldsymbol{A}^{k+1}=2\boldsymbol{A}^{k}-\boldsymbol{A}^{k-1}$,但在求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 这样的矩阵函数时,仍会涉及大量复杂的级数运算.

对更一般的矩阵 $\boldsymbol{A}$,我们只能回归到矩阵函数的定义,即借助于 Jordan 分解或特征值分解来计算矩阵函数. 当然这种方法的计算也不简单.

二、Jordan 分解法

计算原理 函数 $f(z)$ 可展开为收敛半径为 R 的幂级数. 如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})<R$,则可按式 (6.5.2) 来计算矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$.

例 6.5.3 已知矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&-1\\1&0\end{pmatrix}$,求矩阵函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 和 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$.

解: 可求得 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$,其中 $\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}1&1\\0&1\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&1\\1&0\end{pmatrix}$.

当 $f(z)=\mathrm{e}^{z}$ 时, $f(1)=\mathrm{e}, f'(1)=\mathrm{e}$, 则

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\mathrm{e}&\mathrm{e}\\0&\mathrm{e}\end{bmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix}2\mathrm{e}&-\mathrm{e}\\\mathrm{e}&0\end{bmatrix}$$

当 $f(z)=\mathrm{e}^{zt}$ 时(注意这里把 t 看成常数), $f(1)=\mathrm{e}^{\mathrm{T}}, f'(1)=t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}$, 则

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{T}}&t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\\0&\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix}(1+t)\mathrm{e}^{\mathrm{T}}&-t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\\t\mathrm{e}^{\mathrm{T}}&(1-t)\mathrm{e}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$$

例 6.5.4 求矩阵函数 $\sin\boldsymbol{A}$ 和 $\sin(\boldsymbol{A}t)$,其中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与例 2.5.1 相同.

解: 例 2.5.1 中已求得 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$,其中

$$\boldsymbol{J}=\begin{bmatrix}2&0&0\\0&1&1\\0&0&1\end{bmatrix},\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}0&1&0\\0&2&1\\1&-1&-1\end{bmatrix}$$

当 $f(z)=\sin(z)$ 时 $f(1)=\sin 1, f'(1)=\cos 1$, 则

$$\sin\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\sin 2&0&0\\0&\sin 1&\cos 1\\0&0&\sin 1\end{bmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix}\sin 1-2\cos 1&\cos 1&0\\-4\cos 1&\sin 1+2\cos 1&0\\\sin 1+2\cos 1-\sin 2&-\sin 1-\cos 1+\sin 2&\sin 2\end{bmatrix}$$

当 $f(z)=\sin(zt)$ 时(注意 t 是常数), $f(1)=\sin t, f'(1)=t\cos t$, 则

$$\sin(\boldsymbol{A}t)=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\sin 2t&0&0\\0&\sin t&t\cos t\\0&0&\sin t\end{bmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix}\sin t-2t\cos t&t\cos t&0\\-4t\cos t&\sin t+2t\cos t&0\\\sin t+2t\cos t-\sin 2t&-\sin t-t\cos t+\sin 2t&\sin 2t\end{bmatrix}$$

例 6.5.5 证明:设 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值的实部均小于零,则 $\lim\limits_{t\to+\infty}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{O}$.

证明:设 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$，其中 $\boldsymbol{J}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_1,\boldsymbol{J}_2,\cdots,\boldsymbol{J}_s)$，则

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{P}^{-1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}^{-1}\mathrm{diag}(\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}_1t},\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}_2t},\cdots,\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}_st})\boldsymbol{P}$$

其中，$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}_it}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\lambda_it} & t\,\mathrm{e}^{\lambda_it} & \cdots & \dfrac{1}{(m_i-1)!}t^{m_i-1}\mathrm{e}^{\lambda_it}\\ & \mathrm{e}^{\lambda_it} & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & t\,\mathrm{e}^{\lambda_it}\\ & & & \mathrm{e}^{\lambda_it}\end{pmatrix}\quad(i=1,2,\cdots,s)$$

设 $\lambda_i=a_i+jb_i$，$j=\sqrt{-1}$，由题知 $a_i<0$，$i=1,2,\cdots,s$，因此

$$\lim_{t\to+\infty}\mathrm{e}^{\lambda_it}=\lim_{t\to+\infty}(\mathrm{e}^{a_i})^{\mathrm{T}}(\cos b_it+j\sin b_it)=0$$

故 $\lim\limits_{t\to+\infty}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}_it}=\boldsymbol{O}$，从而 $\lim\limits_{t\to+\infty}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}=\boldsymbol{O}$，这样就有 $\lim\limits_{t\to+\infty}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\lim\limits_{t\to+\infty}\boldsymbol{P}^{-1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{O}$. 证毕.

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可对角化时，Jordan 分解法就特殊化为下面的特征值分解法.

三、特征值分解法

计算原理　函数 $f(z)$ 可展开为收敛半径为 R 的幂级数. 设可对角化矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P\Lambda P}^{-1}$，这里 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$. 如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径 $\rho(\boldsymbol{A})<R$，则由式(6.5.2)可知

$$f(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{P}\cdot f(\boldsymbol{\Lambda})\cdot\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}\cdot\mathrm{diag}[f(\lambda_1),\cdots,f(\lambda_n)]\cdot\boldsymbol{P}^{-1}$$

例 6.5.6　求矩阵函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 和 $\cos\boldsymbol{A}$，其中 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4&6&0\\-3&-5&0\\-3&-6&1\end{pmatrix}$.

解:矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1=-2,\lambda_2=\lambda_3=1$.

$\lambda_1=-2$ 对应的特征向量为 $\boldsymbol{a}_1=(-1,1,1)^{\mathrm{T}}$；$\lambda_2=\lambda_3=1$ 对应的特征向量为 $\boldsymbol{a}_2=(-2,1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{a}_3=(0,0,1)^{\mathrm{T}}$，因此相似矩阵 $\boldsymbol{P}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3)=\begin{pmatrix}-1&-2&0\\1&1&0\\1&0&1\end{pmatrix}$. 从而

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-2t}&&\\&\mathrm{e}^{t}&\\&&\mathrm{e}^{t}\end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{pmatrix}2\mathrm{e}^{t}-\mathrm{e}^{-2t}&2\mathrm{e}^{t}-2\mathrm{e}^{-2t}&0\\\mathrm{e}^{-2t}-\mathrm{e}^{t}&2\mathrm{e}^{-2t}-\mathrm{e}^{t}&0\\\mathrm{e}^{-2t}-\mathrm{e}^{t}&2\mathrm{e}^{-2t}-2\mathrm{e}^{t}&\mathrm{e}^{t}\end{pmatrix}$$

$$\cos\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}\cos(-2)&&\\&\cos1&\\&&\cos1\end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=\begin{pmatrix}2\cos1-\cos2&2\cos1-2\cos2&0\\\cos2-\cos1&2\cos2-\cos1&0\\\cos2-\cos1&2\cos2-2\cos1&\cos1\end{pmatrix}$$

例 6.5.7 用特征值分解法重解例 6.5.1.

解:因为 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}$,即 $\boldsymbol{B}$ 是实对称矩阵,可以正交对角化.

由于 $\boldsymbol{y}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 的单位列向量,所以 $r(\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})=1$,这说明矩阵 $\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$ 的非零特征值只有一个. 又因为 $(\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})=1\cdot\boldsymbol{y}$,所以 1 是矩阵 $\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$ 的唯一非零特征值,从而可求得矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$ 的特征值为 $0,1,\cdots,1$.

显然,$\boldsymbol{y}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值 0 所对应的特征向量;任取 $z\in W$,其中 $W=\mathrm{span}(\boldsymbol{y})^{\perp}$,显然 $\boldsymbol{y}\perp\boldsymbol{z}$,因此 $\boldsymbol{B}z=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{z}=\boldsymbol{z}-(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z})\boldsymbol{z}=\boldsymbol{z}-0\cdot\boldsymbol{z}=1\cdot\boldsymbol{z}$,即 $\boldsymbol{z}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值 1 所对应的特征向量. 由于 $\dim W=n-1$ 且 B 是实对称矩阵,故可取到 W 的一组标准正交基 $\boldsymbol{y}_2,\boldsymbol{y}_3,\cdots,\boldsymbol{y}_n$.

令 $\boldsymbol{Y}=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)$,显然 $\boldsymbol{Y}$ 是正交矩阵,并且 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{YDY}^{-1}=\boldsymbol{YDY}^{\mathrm{T}}$,此即

$$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)\begin{pmatrix}0&&&\\&1&&\\&&\ddots&\\&&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}\\\boldsymbol{y}_2\\\vdots\\\boldsymbol{y}_n\end{pmatrix}=\boldsymbol{y}_2\boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{y}_3\boldsymbol{y}_3^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{y}_n\boldsymbol{y}_n^{\mathrm{T}}$$

从而

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}}=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_n)\begin{pmatrix}\mathrm{e}^0&&&\\&\mathrm{e}^1&&\\&&\ddots&\\&&&\mathrm{e}^1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{y}\\\boldsymbol{y}_2\\\vdots\\\boldsymbol{y}_n\end{pmatrix}=\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}+\mathrm{e}(\boldsymbol{y}_2\boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{y}_3\boldsymbol{y}_3^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{y}_n\boldsymbol{y}_n^{\mathrm{T}})$$

$$=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})+\mathrm{e}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}+(\mathrm{e}-1)\boldsymbol{B}$$

利用矩阵幂级数求矩阵函数,要保证相应的一元函数 $f(z)$ 必须能够展开成收敛的幂级数,这个条件一般不容易满足. 而根据 Jordan 分解法和特征值分解法,我们只涉及 $f(z)$ 在特征值处的函数值即各阶导数值,即用矩阵的谱集 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 就能表示矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$. 这种"只吃着碗里的,不盯着锅里的"的新思路,拓宽了矩阵函数的定义范围,尤其是对那些不能展开成收敛的幂级数的函数 $f(z)$,也可以定义出相应的矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$.

定义 6.5.3 如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式为

$$m(\lambda)=(\lambda-\lambda_1)^{m_1}\cdots(\lambda-\lambda_s)^{m_s}$$

则对于任意一元复值函数 $f(\lambda)$(我们特意换成了变量 λ),只要

$$f(\lambda_i),f'(\lambda_i),\cdots,f^{(m_i-1)}(\lambda_i)\quad(i=1,2,\cdots,s)$$

有意义,我们就说函数 $f(\lambda)$ **在 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有定义**,并称这些值为函数 $f(\lambda)$ **在 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的谱值**.

定义 6.5.4 设一元复值函数 $f(\lambda)$ 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有定义,且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 Jordan 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{PJP}^{-1}$,这里 $\boldsymbol{J}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_1,\boldsymbol{J}_2,\cdots,\boldsymbol{J}_s)$,则矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$ 定义为

$$f(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{P} \cdot \mathrm{diag}[f(\boldsymbol{J}_1), f(\boldsymbol{J}_2), \cdots, f(\boldsymbol{J}_s)] \cdot \boldsymbol{P}^{-1}$$

其中，$f(\boldsymbol{J}_i)$ 与式 (6.5.3) 相同.

可以证明矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式 $m(\lambda)$ 在谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的谱值全为零. 另外，对两个在谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的谱值对应相等的一元多项式，它们的矩阵函数也相等. 这就是说，对给定的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 而言，任意矩阵多项式 $p(\boldsymbol{A})$ 仅由 $p(\lambda)$ 在 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的谱值确定.

例 6.5.8　求矩阵函数 $\ln\boldsymbol{A}$ 和 $\sqrt{\boldsymbol{A}}$，其中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与例 2.5.1 相同.

解:例 2.5.1 中已求得 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PJP}^{-1}$，其中

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

显然，$f(\lambda) = \ln\lambda$ 和 $g(\lambda) = \sqrt{\lambda}$ 在 $\lambda = 1$ 和 $\lambda = 2$ 都有意义，而且 $\lambda = 1$ 时 $f'(1) = 1$，$g'(1) = \dfrac{1}{2}$，即 $f(\lambda)$ 和 $g(\lambda)$ 在谱集 $\sigma(\boldsymbol{A}) = \{1,2\}$ 上有定义，因此矩阵函数 $\ln\boldsymbol{A}$ 和 $\sqrt{\boldsymbol{A}}$ 都有意义，且

$$\ln\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P} \cdot \ln\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \ln 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ -4 & 2 & 0 \\ -\ln 2 + 2 & \ln 2 - 1 & \ln 2 \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P} \cdot \sqrt{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ -2 & 2 & 0 \\ 2-\sqrt{2} & \frac{3}{2}-\sqrt{2} & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

四、待定系数法

在定义 6.5.4 中，矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$ 只与函数 $f(\lambda)$ 在 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的值有关，这启发我们，如果能够求出一个尽可能简单的函数 $p(\lambda)$（比如复系数多项式），使得两者在 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上都有定义，并且对应的值都相等，那么便应当有 $f(\boldsymbol{A}) = p(\boldsymbol{A})$. 这种通过"狸猫换太子"来以简代繁的方法，就是著名的 Hermite 多项式插值问题.

定义 6.5.5　设一元复值函数 $f(\lambda)$ 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有定义，且 $\boldsymbol{A}$ 有最小多项式

$$m(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)^{m_1} \cdots (\lambda - \lambda_s)^{m_s}$$

如果存在复值多项式函数 $p(\lambda)$，使得 $f(\lambda)$ 与 $p(\lambda)$ 在谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有对应相等的谱值，则矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$ 可定义为 $f(\boldsymbol{A}) = p(\boldsymbol{A})$.

可以证明对 $f(\lambda)$ 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上的那些谱值，多项式函数 $p(\lambda)$ 存在但不唯一.

至此，我们可给出待定系数法的计算原理，即确定 $p(\lambda)$ 的各项系数的原理和方法.

计算原理　设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为

$$\varphi(\lambda) = |\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}| = (\lambda - \lambda_1)^{m_1} \cdots (\lambda - \lambda_s)^{m_s}$$

由带余除法，设有 $f(\lambda) = \varphi(\lambda) g(\lambda) + r(\lambda)$，则可由

$$f(\lambda_i) = r(\lambda_i), f'(\lambda_i) = r'(\lambda_i), \cdots, f^{(m_i - 1)}(\lambda_i) = r^{(m_i - 1)}(\lambda_i) \quad (i = 1, 2, \cdots, s)$$

确定出余式 $r(\lambda)$. 再根据 Cayley-Hamilton 定理，有 $\varphi(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{O}$，从而 $f(\boldsymbol{A}) = r(\boldsymbol{A})$.

例 6.5.9　求矩阵函数 $e^{\boldsymbol{A}}$，其中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与例 2.5.1 相同.

解：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为 $\varphi(\lambda) = (\lambda - 1)^2(\lambda - 2)$. 设 $f(\lambda) = e^{\lambda}$，且

$$f(\lambda) = \varphi(\lambda) g(\lambda) + r(\lambda) = \varphi(\lambda) g(\lambda) + a + b\lambda + c\lambda^2$$

则

$$\begin{cases} f(1) = e = a + b + c = r(1) \\ f(2) = e^2 = a + 2b + 4c = r(2) \\ f'(1) = e = b + 2c = r'(1) \end{cases}$$

解得 $a = c = e^2 - 2e =, b = -2e^2 + 5e$. 因此

$$f(\boldsymbol{A}) = e^{\boldsymbol{A}} = r(\boldsymbol{A}) = a\boldsymbol{I} + b\boldsymbol{A} + c\boldsymbol{A}^2 = \begin{pmatrix} -e & e & 0 \\ -4e & 3e & 0 \\ -e^2 + 3e & e^2 - 2e & e^2 \end{pmatrix}$$

例 6.5.10　已知可控标准型 $\boldsymbol{C}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}$，求含参矩阵指数函数 $e^{\boldsymbol{C}_1 t}$.

解：矩阵 $\boldsymbol{C}_1$ 的特征多项式为 $\varphi(\lambda) = \lambda^3 - 3\lambda - 2 = (\lambda + 1)^2(\lambda - 2)$，因此 $\boldsymbol{C}_1$ 的特征值为 $\lambda = 2, -1$. 对重特征值 $\lambda = -1$，由于 $n - r(\boldsymbol{C}_1 + \boldsymbol{I}) = 3 - 2 = 1$，因此 $\lambda = -1$ 只有 1 个特征向量，即矩阵 $\boldsymbol{C}_1$ 的 Jordan 标准型为 $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$. 设 $f(\lambda) = e^{\lambda t}$（注意把 t 看成常数），且

$$f(\lambda) = \varphi(\lambda) g(\lambda) + r(\lambda) = \varphi(\lambda) g(\lambda) + a + b\lambda + c\lambda^2$$

注意到 $f'(\lambda) = te^{\lambda t}$，$r'(\lambda) = b + 2c\lambda$，则

$$\begin{cases} f(2) = e^{2t} = a + 2b + 4c = r(2) \\ f(-1) = e^{-t} = a - b + c = r(-1) \\ f'(-1) = te^{-t} = b - 2c = r'(-1) \end{cases}$$

解得 $a = \frac{1}{9}[e^{2t} + (8 + 6t)e^{-t}], b = \frac{1}{9}[2e^{2t} + (3t - 2)e^{-t}], c = \frac{1}{9}[e^{2t} - (1 + 3t)e^{-t}]$，从而

$$e^{C_1 t} = a\boldsymbol{I} + b\boldsymbol{C}_1 + c\boldsymbol{C}_1{}^2 = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} e^{2t} + (8+6t)e^{-t} & 2e^{2t} - (2-3t)e^{-t} & e^{2t} - (1+3t)e^{-t} \\ 2e^{2t} - (2+6t)e^{-t} & 4e^{2t} + (5-3t)e^{-t} & 2e^{2t} - (2-3t)e^{-t} \\ 4e^{2t} - (4-6t)e^{-t} & 8e^{2t} - (8-3t)e^{-t} & 4e^{2t} + (5-3t)e^{-t} \end{pmatrix}$$

Matlab 中提供了内置函数 expm、logm 和 sqrtm 可分别计算矩阵指数函数 $e^{\boldsymbol{A}}$ 矩阵对数函数 $\ln\boldsymbol{A}$ 和矩阵开方函数 $\sqrt{\boldsymbol{A}}$. 但是在 Matlab 中没有提供专门的内置函数来计算 $\sin\boldsymbol{A}$ 和 $\cos\boldsymbol{A}$. 好在我们可以通过自定义函数接口

```
funm(A, @ sin)
```

带回 $\sin\boldsymbol{A}$. 另外除内置函数 expm 外，logm、sqrtm 和自定义函数接口 funm 都不支持符号计算.

6.5.3　矩阵指数函数的数值计算：Krylov 子空间法

熟悉现代控制理论的读者都知道矩阵指数函数 $e^{\boldsymbol{A}}$ 的重要性. 对于它的数值计算问题，显然可利用矩阵级数 $e^{\boldsymbol{A}} = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \dfrac{\boldsymbol{A}^k}{k!}$ 来计算它，此即 Matlab 内置函数 expmdemo2（原名 expm2）的实现原理，其代码如下：

```
function E =  expmdemo2(A)
E =  zeros(size(A));F =  eye(size(A));k =  1;
while norm(E+ F- E,1) >  0
  E =  E +  F;
  F =  A* F/k;
  k =  k+ 1;
end
```

遗憾的是，这个算法只适用于教学目的，碰到实际问题根本不可行. 这是因为随着矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的阶数和范数 $\|\boldsymbol{A}\|$ 的增大，计算结果的准确性越来越差，计算时间也越来越慢. 究其原因，是因为即使 $\boldsymbol{A}$ 是稀疏的，$e^{\boldsymbol{A}}$ 一般也是稠密的.

根据上一节的分析，我们也可以借助于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V\Lambda V}^{\mathrm{H}}$ 来计算 $e^{\boldsymbol{A}}$，此即 Matlab 内置函数 expmdemo3（原名 expm3）的实现原理，其代码如下：

```
function E =  expmdemo3(A)
[V,D] =  eig(A); E =  V *  diag(exp(diag(D))) / V;
```

但这种算法只对对称矩阵和正交矩阵等正规矩阵有效. 当 $\boldsymbol{A}$ 是亏损矩阵时，此算法完全无效. 因此这个算法也仅适用于教学.

这样看来，如何有效又快速地计算 $e^{\boldsymbol{A}}$，就显得尤为重要. 事实上，expm 是 1984 年 Matlab 最早提供的 80 个内置函数之一，其理论基础则来自 Moler 和 Van Loan 在 1978 年发表的著名的综述性论文. 在该文中，他们共列举了 19 种算法，其中基于 Padé 逼近的折半加倍法是使用最广泛的一种算法，expm 就是根据这一方法来实现的. 如今几十年过去了，正如前面已指出的那样，Krylov 子空间法已经成为大规模计算的首选方法.

事实上，$e^{\boldsymbol{A}}$ 的计算量是 $O(n^3)$，当 n 较大时，这也是“几乎不可能完成的任务”. 当然

绝大部分应用中,我们需要计算的不是矩阵 e^A,而是矩阵向量积 $e^A\boldsymbol{v}$,这里 $\boldsymbol{v}$ 是已知向量.因此用 Krylov 子空间法解决这一问题的思路,就是通过一个适当规模的"小型问题"来近似计算大规模问题 $e^A\boldsymbol{v}$. 比如对非对称矩阵 $\boldsymbol{A}$, 以 $\boldsymbol{v}$ 为初始向量,借助于 Arnoldi 过程,我们可得到 $\boldsymbol{A}$ 的 Hessenberg 分解 $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k=\boldsymbol{H}_k$,这样就有 $e^A\boldsymbol{v}\approx\boldsymbol{V}_k e_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{V}_k e^{\boldsymbol{H}_k}e_1$,其中 $\boldsymbol{e}_1$ 为 k 阶单位矩阵的第一列.

可以证明,上述 Arnoldi 方法满足下列误差界.

定理 6.5.6 设 $\boldsymbol{A}$ 的**值域**(range) $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 包含在圆盘内,即

$$\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\mid \boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n,\|\boldsymbol{x}\|_2=1\}\subset\{z\in\mathbb{C}\,\|z+\rho|\leqslant\rho\}$$

则

$$\|e^{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}_k e^{\boldsymbol{H}_k}\boldsymbol{e}_1\|_2\leqslant 12e^{-\rho}\left(\frac{e\rho}{m}\right)^m,\ m>2\rho$$

对于任意矩阵 $\boldsymbol{A}$,可通过平移,即取 $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbb{R}$ 使得 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{I}$ 的值域 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x}$ 位于左半闭平面 $|z+\rho|\leqslant\rho$ 内. 从上述算法易知此时 $\widetilde{\boldsymbol{V}}_k=\boldsymbol{V}_k$, $\widetilde{\boldsymbol{H}}_k=\boldsymbol{H}_k+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{I}$, 从而有

$$\|e^{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}_k e^{\boldsymbol{H}_k}\boldsymbol{e}_1\|_2=e^{-\boldsymbol{\alpha}}\|e^{\widetilde{A}}v-\widetilde{\boldsymbol{V}}_k e^{\widetilde{\mathbf{H}}_k}\boldsymbol{e}_1\|_2\leqslant 12e^{-(\boldsymbol{\alpha}+\rho)}\left(\frac{e\rho}{m}\right)^m,\quad m>2\rho$$

6.6 矩阵的微分与积分

实际使用时,矩阵函数与函数矩阵的微分和积分常常同时出现. 研究矩阵函数和函数矩阵的微分和积分,这对研究微分方程组以及优化问题等都非常重要. 有的学者列出了矩阵分析的五大分析方法(梯度分析、奇异值分析、特征分析、子空间分析和投影分析),其中位于第一的就是梯度分析方法.

6.6.1 含参矩阵函数的微分与积分

定义 6.6.1 设有矩阵函数 $f(\boldsymbol{A})$,其中 $\boldsymbol{A}$ 为常数矩阵,则 $f(\boldsymbol{A}t)$ 是关于参数 t 的函数矩阵,简称**含参矩阵函数**,其导数(如果存在的话)记为 $\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A}t)}{\mathrm{d}t}$,其积分可参照函数矩阵的积分.

例 6.6.1 设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为任意常量方阵,则

(1) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{A}e^{\boldsymbol{A}t}=e^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{A}$;

(2) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\cos\boldsymbol{A}t=-\boldsymbol{A}(\sin\boldsymbol{A}t)=-(\sin\boldsymbol{A}t)\boldsymbol{A}$;

(3) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sin\boldsymbol{A}t=\boldsymbol{A}(\cos\boldsymbol{A}t)=(\cos\boldsymbol{A}t)\boldsymbol{A}$.

例 6.6.2 已知含参矩阵函数

$$f(\boldsymbol{A}t)=\sin(\boldsymbol{A}t)=\begin{pmatrix}\sin 2t+3\sin t & 5\sin 2t-\sin t\\ 3\sin 2t-\sin t & 5\sin 2t+\sin t\end{pmatrix}$$

(1)求矩阵 $\boldsymbol{A}$；(2)求 $\int_a^b f(\boldsymbol{A}t)\mathrm{d}t$.

解:(1)两边对 t 求导,得

$$\boldsymbol{A}\cos(\boldsymbol{A}t)=\begin{pmatrix}2\cos2t+3\cos t & 10\cos2t-\cos t\\ 6\cos2t-\cos t & 10\cos2t+\cos t\end{pmatrix}$$

注意到当 $t=0$ 时，$\cos(\boldsymbol{A}t)=\cos\boldsymbol{O}=\boldsymbol{I}$，因此 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cos\boldsymbol{O}=\begin{pmatrix}5 & 9\\ 5 & 11\end{pmatrix}$

(2)各元素分别对 t 求定积分,得

$$\int_a^b f(\boldsymbol{A}t)\mathrm{d}t=\begin{pmatrix}\int_a^b(\sin2t+3\sin t)\mathrm{d}t & \int_a^b(5\sin2t-\sin t)\mathrm{d}t\\ \int_a^b(3\sin2t-\sin t)\mathrm{d}t & \int_a^b(5\sin2t+\sin t)\mathrm{d}t\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}(\cos a-\cos b)(\cos a+\cos b+3) & (\cos a-\cos b)(5\cos a+5\cos b-1)\\ (\cos a-\cos b)(3\cos a+3\cos b-1) & (\cos a-\cos b)(5\cos a+5\cos b+1)\end{pmatrix}$$

6.6.2　函数对向量的微分

为避免繁冗,本节后面一律只讨论实数域上的情形. 当然通过稍加修改,读者不难将相关结论推广至复数域.

众所周知,多元实函数 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是一元实函数 $f(x)$ 的推广,即将 $\mathbb{R}$ 到 $\mathbb{R}$ 的映射推广为 $\mathbb{R}\times\mathbb{R}\times\cdots\times\mathbb{R}$ 到 $\mathbb{R}$ 的映射. 若记 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$，则 f 也被视为 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}$ 的映射,即 $f(\boldsymbol{x})=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$. 类似地,多元函数的梯度也可视为一元函数的导数的推广,即自变量为向量 $\boldsymbol{x}$ 的导数.

定义 6.6.2　设有多元实函数 $f(\boldsymbol{x})=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$. 称列向量

$$\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1},\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{6.6.1}$$

为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 对向量 $\boldsymbol{x}$ 的**微分**或**梯度**,记为 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 或 $\nabla_x f(\boldsymbol{x})$，也记为 $\mathrm{grad}f(\boldsymbol{x})$ 或 $\nabla f(\boldsymbol{x})$.

显然,梯度的各分量给出了标量函数在该分量上的变化率,从而梯度就给出了当自变量 $\boldsymbol{x}$ 增大时函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的最大增长率;相反,梯度的负值也就是负梯度则指出了当自变量 $\boldsymbol{x}$ 增大时函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的最大减少率.

例 6.6.3　设实方阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$ 均与向量 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 无关,则对

$$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n a_{ij}x_jy_i$$

有

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \tag{6.6.2}$$

特别地,若 $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^n$ 是与 $\boldsymbol{x}$ 无关的列向量,则

$$\nabla_x(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a} = \nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}) \tag{6.6.3}$$

证明: 由于 $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_jy_i = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}a_{ij}x_jy_i = \sum_{j=1}^{n}(\sum_{i=1}^{n}a_{ij}y_i)x_j$, 记 $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n)$, 因此

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{n}a_{ij}y_i = (a_{1j}, a_{2j}, \cdots, a_{nj})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\alpha}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \quad (j = 1, 2, \cdots, n)$$

从而

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{\alpha}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{\alpha}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\alpha}_n^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

特别地,当 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$ 时,注意到 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}$, 即有 $\nabla_x(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a} = \nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a})$. 证毕.

例 6.6.4 对实二次型 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j$, 有

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x} \tag{6.6.4}$$

特别地,当 $\boldsymbol{A}$ 对称时,有

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x}) = \nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{6.6.5}$$

例 6.6.5 当 $\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵时,对实二次泛函 $f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}$, 有

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$$

因此,求实二次泛函 $f(\boldsymbol{x})$ 的极值问题转化为方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的求解问题. 这显然就是定理 6.3.1 指出的变分原理. 类比极值理论可知实二次泛函 $f(\boldsymbol{x})$ 的稳定点(stationary point)是可能的极值点.

注意到梯度 $\nabla_x f(\boldsymbol{x})$ 与自变量 $\boldsymbol{x}$ 是同维的,因此可类似地将梯度推广到自变量为行向量的情形.

定义 6.6.3 设有多元函数 $f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \cdots, x_n), \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$. 称行向量

$$\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right) \tag{6.6.6}$$

为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 对行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的**微分**或**行梯度**,记为 $\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$ 或 $\nabla_{x^{\mathrm{T}}} f(\boldsymbol{x})$.

将梯度中的因变量 $f(\boldsymbol{x})$ 推广到向量函数,我们得到的自然是"梯度"矩阵,它的正式名称是 Jacobi 矩阵.

定义 6.6.4 设 $f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x})$ 都是多元函数,则称 **Jacobi 矩阵**

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{n \times m} \tag{6.6.7}$$

为行向量函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x}))$ 对列向量 $\boldsymbol{x}$ 的微分，简称**行对列的微分**，记为 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 或 $\nabla_x \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$.

特别地，当 $m = n$ 时，称行列式

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{vmatrix} \tag{6.6.8}$$

为 **Jacobi 行列式**，记为 $\frac{\partial(f_1, f_2, \cdots, f_n)}{\partial(x_1, x_2, \cdots, x_n)}$.

显然 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \left(\frac{\mathrm{d}f_1(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}, \frac{\mathrm{d}f_2(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}, \cdots, \frac{\mathrm{d}f_n(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\right)$，即 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 的各列是 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 的各分量对列向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度(仍然是列向量). 同时，注意到 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}}$，即 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$ 的各行是行向量函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 对列向量 $\boldsymbol{x}$ 的各分量求偏导数后所得的行向量. 特别地，当 n 维的列向量 $\boldsymbol{x}$ 退化为 1 维的自变量 x 时，$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(x)}{\mathrm{d}x}$ 退化为行向量 $\left(\frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x}, \frac{\mathrm{d}f_2(x)}{\mathrm{d}x}, \cdots, \frac{\mathrm{d}f_n(x)}{\mathrm{d}x}\right)$.

定义 6.6.5　设 $f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x})$ 都是多元函数，则称 **Jacobi 矩阵**

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{m \times n} \tag{6.6.9}$$

为列向量函数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = (f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x}))^{\mathrm{T}}$ 对行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的微分，简称**列对行的微分**，记为 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\,\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$ 或 $\nabla_{x^{\mathrm{T}}} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$.

显然，$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$ 的每行是 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 的各分量对行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的行梯度(仍然是列向量).

例 6.6.6 对 $f(\boldsymbol{x})=(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$，有 $\nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{I}$.

例 6.6.7 对 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$，有 $\nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}$.

有了 Jacobi 矩阵的概念，借助于例 6.6.6，式 (6.6.2) 和式 (6.6.4) 可推广如下：

例 6.6.8 对 $f(\boldsymbol{x})=[y(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}z(\boldsymbol{x})$，其中列向量 $y(\boldsymbol{x})$ 和 $z(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的向量函数，则

$$\nabla_x f(\boldsymbol{x})=\nabla_x[y(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}z(\boldsymbol{x})+\nabla_x[z(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}y(\boldsymbol{x}) \tag{6.6.10}$$

证明: 令 $\boldsymbol{y}=y(\boldsymbol{x})$，$\boldsymbol{z}=z(\boldsymbol{x})$. 注意到 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}=(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{z})$，并根据式 (6.4.1)，可知

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_i}(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z})&=\frac{\partial}{\partial x_i}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{z})=\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\right)+\left(\boldsymbol{y},\frac{\partial}{\partial x_i}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{z})\right)\\&=\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\right)+\left(\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{z}\right)=\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{y},\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\right)+\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{z}\right)\quad(\text{理由?})\\&=\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}+\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

由于 $\dfrac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$ 和 $\dfrac{\partial}{\partial x_i}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}$ 分别是 $[\nabla_x y(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}$ 和 $\nabla_x[z(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}$ 的第 i 行，因此即得式 (6.6.10). 证毕.

显然，当 $y(\boldsymbol{x})=z(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}$ 时，由于 $\nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{I}$，可知式 (6.6.10) 特殊为式 (6.6.4)；当 $y(\boldsymbol{x})=a$，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$ 且 $z(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}$ 时，由于 $\nabla_x(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{O}$ 及 $\nabla_x(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{I}$，可知式 (6.6.10) 特殊为式 (6.6.2).

借助于 Jacobi 矩阵，可以证明，实函数 $f(\boldsymbol{x})$ 对列向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度运算也具有如下运算法则：

(1)线性法则：$\nabla_x(af(\boldsymbol{x})+bg(\boldsymbol{x}))=a\,\nabla_x f(\boldsymbol{x})+b\,\nabla_x g(\boldsymbol{x})$，$a,b\in\mathbb{R}$；

(2)乘积法则：$\nabla_x(f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x}))=g(\boldsymbol{x})\,\nabla_x f(\boldsymbol{x})+f(\boldsymbol{x})\,\nabla_x g(\boldsymbol{x})$；

(3)链式法则：$\nabla_x(f(y(\boldsymbol{x})))=\nabla_x[y(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\,\nabla_y f(\boldsymbol{y})$，其中 $y(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的向量函数.

在微积分中，经过坐标变换 $x=r\cos\theta$，$y=r\sin\theta$，直角坐标系下的二重积分 $\iint_{D_{xy}}f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ 变成了极坐标下的二重积分 $\iint_{D_{r\theta}}f(r\cos\theta,r\sin\theta)\left|\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}\right|\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta$，其中的 $\left|\dfrac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}\right|=r$ 也是 Jacobi 行列式.

常用的梯度公式如表 6-2 所示，其中的 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{b}$ 分别是与 $\boldsymbol{x}$ 无关的常矩阵和常向量.

表 6-2 常用梯度公式

$f(\boldsymbol{x})$	$\nabla_x f(\boldsymbol{x})$	$f(\boldsymbol{x})$	$\nabla_x f(\boldsymbol{x})$
$a\boldsymbol{x}$	a	$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$
$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 或 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}$
$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 或 $\Vert\boldsymbol{x}\Vert_2^2$	$2\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$	$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}$
$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}$	$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$		

多元函数对向量的微分也可以推广到二阶的情形.

定义 6.6.6　对多元函数 $f(\boldsymbol{x})=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$，称 Hessian 矩阵

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1\partial x_n}\\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n\partial x_n}\end{bmatrix}$$

为 $f(\boldsymbol{x})$ 对列向量 $\boldsymbol{x}$ 的**二阶微分**，记为 $\nabla_x^2 f(\boldsymbol{x})$ 或 $\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}\partial\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$，也记为 $\boldsymbol{H}(f)$.

显然，Hessian 矩阵实质上是梯度的梯度，即 $\nabla_{x^{\mathrm{T}}}(\nabla_x f(\boldsymbol{x}))$，其第 j 行就是梯度 $\nabla_x f(\boldsymbol{x})$ 第 j 个分量的行梯度. 因此实际计算时可先算出梯度 $\nabla_x f(\boldsymbol{x})$，再计算 $\nabla_x f(\boldsymbol{x})$ 对行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的行梯度.

例 6.6.9　当 $\boldsymbol{A}$ 对称时，二次泛函 $f(\boldsymbol{x})=\dfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{c}$ 的 Hessian 矩阵为

$$\nabla_x^2 f(\boldsymbol{x})=\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}\partial\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\boldsymbol{A}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 还是正定的，并且存在 $\boldsymbol{x}^*$，使得 $\nabla_x f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$，则由 $\nabla_x^2 f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{A}>0$ 可知 $\boldsymbol{x}^*$ 是二次泛函的严格局部极小点. 这个结论显然是微积分中多元函数极值判别法的推广.

6.6.3　矩阵标量函数对矩阵的微分

实际应用中，经常要考虑诸如矩阵的迹及矩阵的行列式等矩阵标量函数与矩阵元素值变化之间的关系，比如扰动分析中某个矩阵元素值的变化对矩阵的迹的影响等. 矩阵标量函数显然可理解为 mn 元的函数，即 $f(\boldsymbol{A})=f(a_{11},a_{12},\cdots,a_{1n},a_{21},\cdots,a_{mn})$. 因此，有必要将梯度推广到矩阵标量函数.

定义 6.6.7　设有矩阵标量函数 $f(\boldsymbol{A})$，这里 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{m\times n}$. 如果 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{ij}}$ 都存在 $(i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n)$，则称梯度矩阵

$$\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{11}} & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{12}} & \cdots & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{1n}}\\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{21}} & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{22}} & \cdots & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{2n}}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{m1}} & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{m2}} & \cdots & \dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{mn}}\end{bmatrix}_{m\times n}$$

为函数 $f(\boldsymbol{A})$ 对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的微分，记为 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}$.

注意：这里的自变量是矩阵 $\boldsymbol{A}$，并且 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 是同维矩阵. 当 $\boldsymbol{A}$ 特殊为列向量 $\boldsymbol{x}$ 时，梯度矩阵 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}$ 特殊为梯度 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}$. 对行梯度可做同样理解.

例 6.6.10　对矩阵的迹 $f(\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$，有 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I}$.

例 6.6.11　对双线性型 $f(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \sum\limits_{i=1}^{n}\sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}x_i y_j$，有 $\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$.

例 6.6.12　对行列式 $f(\boldsymbol{A}) = |\boldsymbol{A}|$，有 $f(\boldsymbol{A}) = \sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}A_{ij}$，因此 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial a_{ij}} = A_{ij}$，从而

$$\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}} = (\boldsymbol{A}^*)^{\mathrm{T}}$$

这里，$\boldsymbol{A}^*$ 表示 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵. 显然，当 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，$\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}} = |\boldsymbol{A}|(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{T}}$.

例 6.6.13　对矩阵乘积的迹 $f(\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \sum\limits_{i=1}^{m}\sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ji}$，有

$$\left(\frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}\right)_{ij} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}}\left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}b_{ji}\right) = b_{ji}$$

因此，$\dfrac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$.

6.6.4　矩阵对矩阵的微分

矩阵标量函数还可以进一步推广到因变量也是矩阵的函数. 一般地，我们称映射

$$F: \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n} \mapsto F(\boldsymbol{A}) \in \mathbb{R}^{p\times q}$$

为**矩阵值函数**(matrix-valued function). 显然，矩阵值函数 $F(\boldsymbol{A}) = (f_{ij}(\boldsymbol{A}))_{p\times q}$ 的元素 $f_{ij}(\boldsymbol{A})$ 都是矩阵标量函数. 另外，前述所有函数都可视为矩阵值函数的特殊情形.

定义 6.6.8　设矩阵值函数 $F(\boldsymbol{A}) = (f_{ij}(\boldsymbol{A}))_{p\times q}$，$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 的所有元素 $f_{ij}(\boldsymbol{A})$ 对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的微分都存在，则称 $mp \times nq$ 矩阵

$$\begin{pmatrix}
\dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{11}} & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{12}} & \cdots & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{1n}} \\
\dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{21}} & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{22}} & \cdots & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{2n}} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{m1}} & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{m2}} & \cdots & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{mn}}
\end{pmatrix}$$

为 $F(\boldsymbol{A})$ 对 $\boldsymbol{A}$ 的微分,记为 $\dfrac{\mathrm{d}F(\boldsymbol{A})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}$ 或 $\left(\dfrac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}}\right)_{mp\times nq}$ $(k=1,2,\cdots,m;\ l=1,2,\cdots,n)$, 其中

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f_{11}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \dfrac{\partial f_{12}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{1q}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}}\\ \dfrac{\partial f_{21}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \dfrac{\partial f_{22}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{2q}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_{p1}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \dfrac{\partial f_{p2}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{pq}(\boldsymbol{A})}{\partial a_{kl}}\end{pmatrix}_{p\times q}$$

例 6.6.14　已知 $\boldsymbol{a}=(a_1,a_2,a_3)^{\mathrm{T}}$, 设 $\boldsymbol{A}=(x_{ij})_{2\times 3}$, 求 $\dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}},\dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{Aa})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}$.

解:因为

$$\boldsymbol{Aa}=\begin{pmatrix}\sum_{k=1}^{3}x_{1k}a_k\\ \sum_{k=1}^{3}x_{2k}a_k\end{pmatrix},(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}=\left(\sum_{k=1}^{3}x_{1k}a_k,\sum_{k=1}^{3}x_{2k}a_k\right)$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{11}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{12}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{13}}\\ \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{21}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{22}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})^{\mathrm{T}}}{\partial x_{23}}\end{pmatrix}=\left(\begin{array}{cc|cc|cc}a_1 & 0 & a_2 & 0 & a_3 & 0\\ \hline 0 & a_1 & 0 & a_2 & 0 & a_3\end{array}\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{Aa})}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{11}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{12}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{13}}\\ \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{21}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{22}} & \dfrac{\partial(\boldsymbol{Aa})}{\partial x_{23}}\end{pmatrix}=\left(\begin{array}{c|c|c}a_1 & a_2 & a_3\\ 0 & 0 & 0\\ \hline 0 & 0 & 0\\ a_1 & a_2 & a_3\end{array}\right).$$

Matlab 中提供了内置函数 jacobian,调用格式为

```
jacobian(f,v)
```

可用于计算标量函数 f 对向量 v 的梯度,以及向量函数对向量 v 的 jacobi 矩阵,函数的返回结果是向量或矩阵,其中的(i,j)元素是 $\mathrm{d}f(i)/\mathrm{d}v(j)$. 注意这里自变量 v 也可以是标量,此时函数 jacobian 相当于代码 diff(f,v). 另外特别要注意的是,计算梯度时返回的一律是行向量.

内置函数 jacobian 也可用于计算矩阵值函数 f 对矩阵 A 的微分,只是其计算结果与理论结果在表述形式上存在很大区别,需要仔细甄别. 比如对上例,使用如下代码:

```
syms x11 x12  x13 x21 x22 x23  a1 a2 a3
A= [x11 x12 x13; x21 x22 x23]; a= [a1; a2; a3 ];
```

```
f= A* a; R1= jacobian(f,A);
```

返回的结果是

```
[ a1,  0, a2,  0, a3,  0 ]
[ 0,  a1,  0, a2,  0, a3]
```

6.6.5 成于计算,败于算计

"尊贵的夫人,卡尔·雅可比(Karl Jacobi,见图 6-11)愿意为您效劳!""哦! 雅可比先生,莫里茨是令兄吗? 我真为他骄傲.""对不起,美丽的夫人,我不是他的兄弟,他是我的兄弟."如今,以 Jacobi 迭代、Jacobi 矩阵、Jacobi 行列式、Jacobi 符号、Jacobi 旋转、Jacobi 椭圆函数、Jacobi 多项式、Jacobi 积分、Hamilton-Jacobi 微分方程……不朽于世的卡尔,在生前的名气却远远不如哥哥莫里茨·雅可比(Moritz Jacobi,1801—1874),因为莫里茨是夫人们最为关心的黄金加工工艺电镀法的发明人(当然她们后来大概也明白了其中的"洗金"骗术).



图 6-11　卡尔·雅可比(1804—1851)

雅可比出生于普鲁士一个富有的银行家家庭,自小就跟着舅舅学习古典文学和数学. 从一开始,他就显露出"多才多艺的头脑",12 岁一入中学就被编入毕业班. 因为柏林大学不接收少年大学生,他只好在毕业班里连续待了好几年. 雅可比反对靠死记硬背来学数学,加之老师欣赏他的数学天才,同意他自学,这使得他在高中阶段就能够研读欧拉的《无穷小分析导论》,并开始研究五次方程. 考入柏林大学后,由于当时大学教育的水平,柏林大学提供给他的东西,以至于以后在他看来,大学的数学讲座就是"废话".

雅可比已决定要把全部精力献给数学,要"深入洞察由欧拉、拉格朗日和拉普拉斯的工作所堆成的大山的本质",为此,他开始以"最惊人的力量和最艰苦的思考",来"制服这个庞然大物". 他是如此地勤奋,以至于当一位朋友向他抱怨做科研既艰苦也有损健康时,他大力驳斥说:"那又怎样呢? 只有卷心菜没有神经没有焦虑,但它们完美的健康又能给它们什么呢?"1827 年,他在高斯二次剩余的基础上,得到了三次剩余的一些成果,并把它们寄给了高斯,这赢得了高斯的大力赞扬. 鉴于高斯很少称赞别人,这也让教育部注意到此事,并决定将这个 23 岁的年轻人直接晋升为副教授. 两年后,雅可比发表了他的第一篇杰作"椭圆函数理论的新基础",证实了自己并非浪得虚名. 而他在椭圆函数上的这种"新基础",更是让浸淫于椭圆函数 40 年的顶级专家勒让德顿感自己的成果毫无价值,"通过你的工作,你已将自己置身于当前最伟大的分析学家之列."这是勒让德对他由衷地赞叹.

从 1826 年起,雅可比开始任职于哥尼斯堡大学. 在这里,他和弗朗茨·诺依曼以及贝塞尔一起,在教学中开创了"讨论班"模式,吸引了许多学生,其中就包括海森(Ludwig Otto Hesse,1811—1874,1842 年提出 Hessian 行列式,即 $\boldsymbol{H}(f)$ 的行列式)和赛德尔(Philipp Ludwig von Seidel,1821—1896,贡献了 Gauss-Seidel 迭代法). 他鼓励学生在掌

握前人总结的知识之前，就去尝试研究别人不曾做过的工作，养成独立工作的习惯．为此，他"打比方"道："如果你父亲坚持要先认识世界上所有的姑娘，然后再跟其中一个结婚，那他就永远不会结婚，而你现在也就不会在这里．"

近乎狂热的研究热情和过度的工作摧垮了他的身体，1843 年，他被查出得了糖尿病．医生建议他去意大利休养，这显然花费靡巨．尽管他出生富有，但几年前家里就破产了．经过狄利克雷和洪堡(Alexander von Humboldt，1769－1859，被誉为德国的"科学王子"和"新亚里士多德"，他的哥哥威廉创立了洪堡大学)的协助，非常重视荣誉的普鲁士国王腓特烈·威廉四世(1795－1861，1840－1861 年在位)给了他一笔不菲的津贴，并且同意他"愿意休息多久就休息多久"，后来更允许他住在气候更适宜他的柏林继续养病．

到了 1848 年，欧洲大陆开始动荡．此时医生开出了一个极为愚蠢的"处方"，那就是"政治或许对他的神经系统有好处"．雅可比被选为一个温和自由派的候选人，参加 5 月份的大选．他发表了一篇动人的讲话，让政治家们意识到"这是一位登上了食人岛的、天真无知又有着诱人肥胖的传教士"．在自由派看来，他领取国王的津贴，是保皇党人的密探；在保皇党看来，他是叛徒．盛怒的国王干脆停止了津贴．这位因计算而成名的数学家，最终败给了一场算计．一位朋友收留了他的妻子和七个孩子，这位数学天才则隐居在旅店一间肮脏的房间里，继续自己的数学研究．维也纳大学得知雅可比的困境，开始设法接他过去，但被洪堡及时阻止了．洪堡说服了怒气冲冲的国王，因为"德意志需要留住她的第二个伟大人物雅可比"．津贴最终恢复了，但雅可比经此动荡，身体更加糟糕，三年后即 1851 年，他染上了流感，进而死于天花．

6.7 矩阵函数的应用

利用分析学的理论，可以将非线性问题近似成线性问题．事实上，用"线性化"处理非线性问题是一种重要的思维方式，比如控制中的线性系统理论，其中最典型的就是线性微分方程组在线性系统中的应用．

6.7.1 线性常系数微分方程组

我们知道，线性常系数齐次微分方程

$$x'(t) = ax(t), \quad x(t_0) = x_0 \tag{6.7.1}$$

的通解为 $x(t) = \mathrm{e}^{a(t-t_0)}x_0$．

将 $x(t)$、x_0 推广到向量，将系数 a 推广到对角矩阵、块对角矩阵乃至任意矩阵，即对于**线性常系数齐次微分方程组**

$$\boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t), \quad \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0 \tag{6.7.2}$$

上述结论仍然成立吗？

事实上，与例 2.5.2 中类似，注意到 Jordan 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PJP}^{-1}$，则

$$\boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{PJP}^{-1}\boldsymbol{x}(t)$$

同样，令 $\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}(t)$，则方程组的最简解耦为 $\boldsymbol{y}'(t) = \boldsymbol{J}\boldsymbol{y}(t)$．类比可知，这里应

该成立

$$\boldsymbol{y}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}(t-t_0)}\boldsymbol{y}_0=\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}(t-t_0)}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}_0$$

从而 $\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{P}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}(t-t_0)}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}_0=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}\boldsymbol{x}_0$

定理 6.7.1 线性常系数齐次微分方程组 (6.7.2) 的通解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}\boldsymbol{x}_0 \tag{6.7.3}$$

这里，$\boldsymbol{x}(t)=(x_1(t),\cdots,x_n(t))^{\mathrm{T}}$ 为未知向量，$\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 是常数矩阵，$\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{x}(t_0)=(x_1(t_0),\cdots,x_n(t_0))^{\mathrm{T}}$ 为初始条件.

证明:由于 $(\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(t))'=\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}(-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}(t)+\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}'(t)=0$，两边积分得 $\int_{t_0}^{t}(\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}\boldsymbol{x}(s))'\mathrm{d}s=\boldsymbol{0}$，此即 $\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(t)-\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t_0}\boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{0}$，于是 $\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}\boldsymbol{x}(t_0)$. 证毕.

显然方程 (6.7.1) 是方程组 (6.7.2) 退化到 $n=1$ 时的情形.

例 6.7.1 求线性常系数齐次微分方程组

$$\begin{cases}x_1'(t)=-x_1+x_2\\ x_2'(t)=-4x_1+3x_2\\ x_3'(t)=x_1+2x_3\end{cases}$$

满足初始条件 $\boldsymbol{x}(0)=(x_1(0),x_2(0),x_3(0))^{\mathrm{T}}=(1,1,3)^{\mathrm{T}}$ 的特解.

解:显然方程组的矩阵形式为 $\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)$，这里

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-1&1&0\\-4&3&0\\1&0&2\end{pmatrix},\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,x_3)^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{x}'(t)=(x_1'(t),x_2'(t),x_3'(t))^{\mathrm{T}}$$

根据定理 6.7.1，注意到 $t_0=0$，因此方程组的解为 $\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(0)$.

例 2.5.1 中已求得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解，因此

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{P}\mathrm{e}^{\boldsymbol{J}t}\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{2t}&&\\&\mathrm{e}^{t}&t\mathrm{e}^{t}\\&&\mathrm{e}^{t}\end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{t}-2t\mathrm{e}^{t}&t\mathrm{e}^{t}&0\\-4t\mathrm{e}^{t}&2t\mathrm{e}^{t}+\mathrm{e}^{t}&0\\\mathrm{e}^{t}-\mathrm{e}^{2t}+2t\mathrm{e}^{t}&\mathrm{e}^{2t}-t\mathrm{e}^{t}-\mathrm{e}^{t}&\mathrm{e}^{2t}\end{pmatrix}$$

从而所求特解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(0)=\begin{pmatrix}-(t-1)\mathrm{e}^{t}\\-(2t-1)\mathrm{e}^{t}\\t\mathrm{e}^{t}+3\mathrm{e}^{2t}\end{pmatrix}$$

我们知道，线性常系数非齐次微分方程

$$x'(t)=ax(t)+f(t),\quad x(t_0)=x_0 \tag{6.7.4}$$

的通解为 $x(t)=\mathrm{e}^{a(t-t_0)}x_0+\int_{t_0}^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{a(t-s)}f(s)\mathrm{d}s$，即“非齐次的通解是齐次的通解加上非齐次的特解”.

根据前面的分析，我们自然也会问：将 $x(t)$，x_0 推广到向量，将系数 a 推广到对角矩阵、块对角矩阵乃至任意矩阵，即对于**线性常系数非齐次微分方程组**

$$\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{f}(t),\quad \boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0 \tag{6.7.5}$$

上述结论仍然成立吗？

定理 6.7.2　线性常系数非齐次微分方程组 (6.7.5) 的通解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}\boldsymbol{x}_0+\int_{t_0}^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t-s)}\boldsymbol{f}(s)\mathrm{d}s \tag{6.7.6}$$

这里，$\boldsymbol{f}(t)=(f_1(t),\cdots,f_n(t))^{\mathrm{T}}$，其他与定理 6.7.1 相同.

证明：用 $\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}$ 左乘方程 (6.7.5) 两边，并整理得

$$\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}'(t)+\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}(-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{f}(t)$$

此即 $(\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(t))'=\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{f}(t)$. 对此式两边积分，得 $\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(t)-\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}t_0}\boldsymbol{x}(t_0)=\int_{t_0}^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}\boldsymbol{f}(s)\mathrm{d}s$. 再用 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 左乘此方程两边，整理后即得所需结论. 证毕.

例 6.7.2　已知线性常系数非齐次微分方程组 $\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{f}(t)$，这里这里 $\boldsymbol{A}$ 同例 6.7.1，$\boldsymbol{f}(t)=(\mathrm{e}^t,\mathrm{e}^t,\mathrm{e}^{4t})^{\mathrm{T}}$，求其满足初始条件 $\boldsymbol{x}(0)=(1,1,3)^{\mathrm{T}}$ 的解.

解：$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 的计算结果见例 6.7.1. 而

$$\boldsymbol{x}_h=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(0)=\begin{pmatrix}-(t-1)\mathrm{e}^t\\-(2t-1)\mathrm{e}^t\\t\mathrm{e}^t+3\mathrm{e}^{2t}\end{pmatrix},\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}\boldsymbol{f}(s)=\begin{pmatrix}s+1\\2s+1\\\mathrm{e}^{2s}-s\end{pmatrix},\int_0^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}\boldsymbol{f}(s)\mathrm{d}s=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}t(t+2)\\t(t+1)\\\frac{1}{2}\mathrm{e}^{2t}-\frac{1}{2}t^2-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

这样，非齐次方程的特解为

$$\boldsymbol{x}_p=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\int_0^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}f(s)\mathrm{d}s=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}t(t-2)\mathrm{e}^t\\-t(t-1)\mathrm{e}^t\\\frac{1}{2}\mathrm{e}^{4t}-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{2t}+\frac{1}{2}t^2\mathrm{e}^t\end{pmatrix}$$

因此，所求为

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_h+\boldsymbol{x}_p=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}(t^2-2)\mathrm{e}^t\\-(t^2+t-1)\mathrm{e}^t\\\frac{1}{2}\mathrm{e}^{4t}+\frac{5}{2}\mathrm{e}^{2t}+\frac{1}{2}t(t+2)\mathrm{e}^t\end{pmatrix}$$

在上述通解中，主要的计算量集中在 e^{At} 上. 我们当然可以借助 expm 来编程实现. 不过，Matlab 中已提供了内置函数 dsolve，可用于求解微分方程的符号解，其调用格式为

```
dsolve('eq1','eq2',...,'cond1','cond2',...,'v')
```

其中，eq 部分为待求解的微分方程，用字符串形式编写，其余部分则根据需要来确定.

前面两个例题的计算代码为：

```
syms t x1 x2 x3  % 声明符号变量
[x1,x2,x3]= dsolve('Dx1= - 1* x1+ x2','Dx2= - 4* x1+ 3* x2',...
    'Dx3= x1+ 2* x3','x1(0)= 1','x2(0)= 1','x3(0)= 3')  % ...是续行符
xh= [x1;x2;x3]  % 齐次方程的通解 x
[x1,x2,x3]= dsolve('Dx1= - 1* x1+ x2+ exp(t)','Dx2= - 4* x1+ 3* x2+ exp(t)',...
    'Dx3= x1+ 2* x3+ exp(4* t)','x1(0)= 1','x2(0)= 1','x3(0)= 3')  % ...是续行符
x= [x1;x2;x3]  % 非齐次方程的通解 x
```

上述代码中，自变量 v 采用了缺省自变量 t，"Dx1"表示 $\frac{dx_1(t)}{dt}$，其他依此类推. 如果要表示 $\frac{d^n y(t)}{dt^n}$，则使用"Dny". 诸如 $y'(c) = d$ 这样的边值条件，则可以表示为"Dy(c)=d".

6.7.2 应用 I：线性定常系统的状态转移矩阵

考虑线性定常连续系统的状态方程

$$\boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(t), \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0 \quad (t \geqslant t_0) \tag{6.7.7}$$

按定理 6.7.2 可知，其通解为

$$\boldsymbol{x}(t) = e^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}\boldsymbol{x}(t_0) + \int_{t_0}^{T} e^{\boldsymbol{A}(t-s)}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(s)ds \tag{6.7.8}$$

其中，第一项是**零输入响应**，它是由初始状态引起的系统自由运动；第二项是**零状态响应**，它是由控制输入 $\boldsymbol{u}(t)$ 所产生的受控运动.

在通解 (6.7.8) 中，记 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0) = e^{\boldsymbol{A}(t-t_0)}$，则 $\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{x}_0 + \int_{t_0}^{T}\boldsymbol{\Phi}(t,s)Bu(s)ds$，显然，矩阵 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$ 起着一种状态转移的作用，表征了从初始状态 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}(t_0)$ 到当前状态 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(t)$ 的转移关系，即时刻 t_0 的状态 $\boldsymbol{x}_0$ 被线性变换到时刻 t 的状态 $\boldsymbol{x}(t)$，因此它被称为**状态转移矩阵**. 事实上，从本质上看，无论是初始状态引起的零输入响应，还是由输入引起的零状态响应，都是一种状态转移，都可用状态转移矩阵来表示，因此状态转移矩阵是对线性系统进行运动分析的基本工具. 这也解释了何以矩阵指数函数在现代控制理论中如此重要，何以控制界如此喜爱 Matlab 软件. 另外，一旦确定矩阵 $\boldsymbol{A}$，就唯一确定了矩阵指数函数 $e^{\boldsymbol{A}}$，也就唯一确定了状态转移矩阵 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$. 从这个意义上说，矩阵刻画了对象的运动，其本质是运动的描述. 还是那句话，"矩阵即变换".

对于状态转移矩阵 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$，易证它满足微分方程

$$\boldsymbol{\Phi}'(t,t_0) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}(t,t_0), \quad \boldsymbol{\Phi}(t_0,t_0) = \boldsymbol{I} \quad (t \geqslant t_0) \tag{6.7.9}$$

并且具有自反性 $\boldsymbol{\Phi}(t,t)=\boldsymbol{I}$、反身性 $\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t,t_0)=\boldsymbol{\Phi}(t_0,t)$ 以及传递性 $\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_0)=\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_1)\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)$. 这些结论显然与下列变换关系是吻合的：

$$\boldsymbol{x}(t_0)\xleftrightarrow[\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t_1,t_0)]{\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)}\boldsymbol{x}(t_1)\xleftrightarrow[\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t_2,t_1)]{\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_1)}\boldsymbol{x}(t_2)$$

6.7.3　矩阵微分方程

考虑一系列线性微分方程组

$$\begin{cases}\boldsymbol{x}'_1(t)=\boldsymbol{A}(t)\,\boldsymbol{x}_1(t), & \boldsymbol{x}_1(t_0)=c_1\\ \boldsymbol{x}'_2(t)=\boldsymbol{A}(t)\,\boldsymbol{x}_2(t), & \boldsymbol{x}_2(t_0)=c_2\\ \quad\cdots\cdots & \quad\cdots\cdots\\ \boldsymbol{x}'_n(t)=\boldsymbol{A}(t)\,\boldsymbol{x}_n(t), & \boldsymbol{x}_n(t_0)=c_n\end{cases}\tag{6.7.10}$$

这里，$\boldsymbol{A}(t)$ 是定义在 (t_0,t) 上的分段连续函数矩阵. 这些方程组具有相同的系数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$，我们自然希望将它们合并在一起进行研究.

令 $\boldsymbol{X}(t)=(\boldsymbol{x}_1(t),\boldsymbol{x}_2(t),\cdots,\boldsymbol{x}_n(t))$，$\boldsymbol{C}=(c_1,c_2,\cdots,c_n)$，则式 (6.7.10) 就变成了**矩阵微分方程**

$$\boldsymbol{X}'(t)=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{X}(t),\ \boldsymbol{X}(t_0)=C\tag{6.7.11}$$

其中，$\boldsymbol{C}$ 称为**初始矩阵**. 方程 (6.7.11) 两边从 t_0 到 t 积分，即得其隐式解为

$$\boldsymbol{X}(t)=\boldsymbol{C}+\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{A}(s)\boldsymbol{X}(s)\mathrm{d}s\tag{6.7.12}$$

另外，方程 (6.7.11) 的解 $\boldsymbol{X}(t)$ 满足 **Jacobi 恒等式**：

$$\det\boldsymbol{X}(t)=\det\boldsymbol{C}\cdot\exp\int_{t_0}^{t}\mathrm{tr}\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s\tag{6.7.13}$$

证明: $$\frac{\mathrm{d}|\boldsymbol{X}(t)|}{\mathrm{d}t}=\sum_{i=1}^{n}\begin{vmatrix}x_{11}(t)&\cdots&x_{1n}(t)\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ \dfrac{\mathrm{d}x_{i1}(t)}{\mathrm{d}t}&\cdots&\dfrac{\mathrm{d}x_{i1}(t)}{\mathrm{d}t}\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ x_{n1}(t)&\cdots&x_{nn}(t)\end{vmatrix}=\sum_{i=1}^{n}\begin{vmatrix}x_{11}(t)&\cdots&x_{1n}(t)\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ \sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}(t)x_{j1}(t)&\cdots&\sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}(t)x_{jn}(t)\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ x_{n1}(t)&\cdots&x_{nn}(t)\end{vmatrix}$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\begin{vmatrix}x_{11}(t)&\cdots&x_{1n}(t)\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ a_{ij}(t)x_{j1}(t)&\cdots&a_{ij}(t)x_{jn}(t)\\ \cdots&\cdots&\cdots\\ x_{n1}(t)&\cdots&x_{nn}(t)\end{vmatrix}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \begin{vmatrix} x_{11}(t) & \cdots & x_{1n}(t) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{ii}(t)x_{i1}(t) & \cdots & a_{ii}(t)x_{in}(t) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1}(t) & \cdots & x_{nn}(t) \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} x_{11}(t) & \cdots & x_{1n}(t) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{i1}(t) & \cdots & x_{in}(t) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1}(t) & \cdots & x_{nn}(t) \end{vmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_{ii}(t)$$

$$= |\boldsymbol{X}(t)| \operatorname{tr}\boldsymbol{A}(t)$$

于是 $\frac{\mathrm{d}|\boldsymbol{X}(t)|}{|\boldsymbol{X}(t)|} = \operatorname{tr}\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t$. 两边从 t_0 到 t 积分，可得 $\ln|\boldsymbol{X}(t)|\,|_{t_0}^{t} = \int_{t_0}^{t} \operatorname{tr}\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$，也就是

$$\ln \frac{|\boldsymbol{X}(t)|}{|\boldsymbol{C}|} = \int_0^{\mathrm{T}} \operatorname{tr}\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$$

因此 $|\boldsymbol{X}(t)| = |\boldsymbol{C}| \exp(\int_0^t \operatorname{tr}\boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s)$. 证毕.

由 Jacobi 恒等式可知，$|\boldsymbol{C}| \neq 0$，即矩阵 $\boldsymbol{C}$ 可逆时，$|\boldsymbol{X}(t)| \neq 0$ 即 $\boldsymbol{X}(t)$ 也可逆. 这意味着初始矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的奇异性决定了解 $\boldsymbol{X}(t)$ 的奇异性，那么不同的 $\boldsymbol{C}$ 确定的解 $\boldsymbol{X}(t)$ 之间又存在什么样的关系呢？

考虑矩阵微分方程

$$\boldsymbol{X}'(t) = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{X}(t), \quad \boldsymbol{X}(t_0) = \boldsymbol{I} \tag{6.7.14}$$

并记其解为 $\boldsymbol{X}_0(t)$.

注意到方程 (6.7.11) 的初始条件 $\boldsymbol{X}(t_0) = \boldsymbol{C} = \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{C} = \boldsymbol{X}_0(t_0)\boldsymbol{C}$，若令 $\boldsymbol{X}(t) = \boldsymbol{X}_0(t)\boldsymbol{C}$，则有

$$\boldsymbol{X}'(t) = \boldsymbol{X}'_0(t)\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{X}_0(t)\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{X}(t)$$

这意味着方程 (6.7.11) 的解 $\boldsymbol{X}(t)$ 可以用方程 (6.7.14) 的解 $\boldsymbol{X}_0(t)$ 表示出来，因此我们称 $\boldsymbol{X}_0(t)$ 为 $A(t)$ 的**基本解矩阵**.

那么基本解矩阵 $\boldsymbol{X}_0(t)$ 又如何表示呢？

注意到当 $\boldsymbol{X}(t)$ 退到为列向量时，方程 (6.7.14) 退化为常系数线性齐次微分方程组 (6.7.2)，类比式 (6.7.3)，这是否意味着方程 (6.7.14) 的解应该是 $\boldsymbol{X}_0(t) = \exp\int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s$ 呢？

将 $\boldsymbol{X}_0(t)$ 展开成矩阵幂级数：

$$X_0(t) = \exp L(t) = I + L(t) + \frac{1}{2!}L^2(t) + \cdots$$

并令 $L(t) = \int_{t_0}^{t} A(t)\mathrm{d}t$，则 $L'(t) = A(t)$，从而

$$\begin{aligned} X_0'(t) &= L'(t) + \frac{1}{2!}(L^2(t))' + \cdots \\ &= A(t) + \frac{1}{2!}(A(t)L(t) + L(t)A(t)) + \cdots \end{aligned}$$

又因为

$$\begin{aligned} A(t)X_0(t) &= A(t)(I + L(t) + \frac{1}{2!}L^2(t) + \cdots) \\ &= A(t) + A(t)L(t) + \frac{1}{2!}A(t)L^2(t) + \cdots \end{aligned}$$

因此，只有当 $A(t)L(t) = L(t)A(t)$ 时，才有 $X_0'(t) = A(t)X_0(t)$，此时方程 (6.7.11) 的解为

$$X(t) = \exp\int_{t_0}^{t} A(s)\mathrm{d}s \cdot C \tag{6.7.15}$$

6.7.4　应用 II:线性时变系统的状态转移矩阵

根据矩阵微分方程理论，线性时变系统的齐次状态方程

$$x'(t) = A(t)x(t),\ x(t_0) = x_0 \quad (t \geqslant t_0) \tag{6.7.16}$$

的通解应为

$$x(t) = X_0(t) \cdot x_0 = \exp\int_{t_0}^{t} A(s)\mathrm{d}s \cdot x_0 \tag{6.7.17}$$

其中，基本解矩阵 $X_0(t)$ 为下列方程的解：

$$X'(t) = A(t)X(t),\ X(t_0) = I \tag{6.7.18}$$

显然，由式 (6.7.17) 可知基本解矩阵 $X_0(t)$ 仍然起到状态转移的效果，那么它是否还具有 $\Phi(t,t_0)$ 的性质呢?

将方程 (6.7.17) 的通解记为 $x(t) = \varphi(t;x_0,t_0)$，容易验证此通解对初始条件是线性的，即

$$\varphi(t;ax_1 + bx_2,t_0) = a\varphi(t;x_1,t_0) + b\varphi(t;x_2,t_0)$$

因此，$\varphi(t;a_1,t_0),\varphi(t;a_2,t_0),\cdots,\varphi(t;a_n,t_0)$ 线性无关当且仅当 $a_1,a_2,\cdots,a_n$ 也线性无关.

设 $x_0 = (k_1,k_2,\cdots,k_n)^{\mathrm{T}}$，注意到 $x_0 = k_1e_1 + k_2e_2 + \cdots + k_ne_n$，因此

$$x(t) = \varphi(t;x_0,t_0) = \sum_{i=1}^{n} k_i\varphi(t;e_i,t_0) = (\varphi(t;e_1,t_0),\varphi(t;e_2,t_0),\cdots,\varphi(t;e_n,t_0))\, x_0$$

显然,上式中的矩阵 $(\varphi(t;\mathbf{e}_1,t_0),\varphi(t;\mathbf{e}_2,t_0),\cdots,\varphi(t;\mathbf{e}_n,t_0))$ 起到了 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$ 的效果,我们仍记之为 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$. 易知 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$ 满足方程 (6.7.18),因此它就是基本解矩阵 $\boldsymbol{X}_0(t)$,即 $\boldsymbol{X}_0(t)=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$.

如果以方程 (6.7.18) 的 n 个线性无关解为列构成矩阵 $\boldsymbol{Y}(t)$,则有 $\boldsymbol{Y}(t)=\boldsymbol{X}_0(t)\boldsymbol{C}$,这里的初始矩阵 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{Y}(t_0)$,因此 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)=\boldsymbol{X}_0(t)=\boldsymbol{Y}(t)\boldsymbol{C}^{-1}$. 由此出发,显然也可以证明 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$ 具有自反性 $\boldsymbol{\Phi}(t,t)=I$、反身性 $\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t,t_0)=\boldsymbol{\Phi}(t_0,t)$ 以及传递性 $\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_0)=\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_1)\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)$. 这些结论同样与下列变换关系是吻合的:

$$\boldsymbol{x}(t_0)\underset{\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t_1,t_0)}{\overset{\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)}{\longleftrightarrow}}\boldsymbol{x}(t_1)\underset{\boldsymbol{\Phi}^{-1}(t_2,t_1)}{\overset{\boldsymbol{\Phi}(t_2,t_1)}{\longleftrightarrow}}\boldsymbol{x}(t_2)$$

对线性时变连续系统的非齐次状态方程为

$$\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{B}(t)u(t),\quad \boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0\quad (t\geqslant t_0)\tag{6.7.19}$$

类比可知,其通解应为 $\boldsymbol{x}(t)=\exp(\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{A}(\tau)\mathrm{d}\tau)\cdot\boldsymbol{x}(t_0)+\int_{t_0}^{t}\exp(\int_{s}^{t}\boldsymbol{A}(\tau)\mathrm{d}\tau)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s$, 即

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\,\boldsymbol{x}_0+\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{\Phi}(t,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s\tag{6.7.20}$$

其中,第一项仍是由初始状态引起的系统自由运动,仍称为**零输入响应**;第二项仍是由控制输入所产生的受控运动,仍称为**零状态响应**.

证明:根据前面的分析,线性时变系统的输出是零输入响应和零状态响应的叠加,因此可设方程 (6.7.19) 的通解为

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\,\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{y}(t)\tag{6.7.21}$$

两边对 t 求导,得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}'(t)&=\boldsymbol{\Phi}'(t,t_0)(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{y}(t))+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{y}'(t)\\&=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)(\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{y}(t))+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)y'(t)\\&=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{y}'(t)\\&=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}(t)}{\mathrm{d}t}-\boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{u}(t)+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{y}'(t)\end{aligned}$$

此即

$$\boldsymbol{y}'(t)=[\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)]^{-1}\boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{u}(t)=\boldsymbol{\Phi}(t_0,t)\boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{u}(t)$$

对上式两边从 t_0 到 t 积分,并注意到 $\boldsymbol{y}(t_0)=\boldsymbol{0}$, 即得

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{y}(t_0)+\int_{t_0}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}(t_0,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s=\int_{t_0}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Phi}(t_0,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s$$

将上式代入式 (6.7.21),并注意到 $\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)$ 的传递性,可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}(t)&=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\,\boldsymbol{x}_0+\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{\Phi}(t_0,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s\\&=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\,\boldsymbol{x}_0+\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{\Phi}(t,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s\end{aligned}$$

证毕.

至此,我们发现线性定常系统和线性时变系统具有统一的表示形式. 当然,前面已提及,只有当 $\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{L}(t)=\boldsymbol{L}(t)\boldsymbol{A}(t)$ 时,线性时变系统的状态响应才具有上述封闭形式. 这个条件在实际中一般不成立,因此这种统一的表示更具有理论意义.

6.7.5　应用 III:线性时变系统的能控性和能观测性

对一个控制系统,存在 kalman 提出的两个基本问题:

(1)在有限时间内,控制作用能否使系统从初始状态转移到要求的状态? 此即控制作用对状态变量的支配能力,称为状态的能控性问题.

(2)在有限时间内,能否通过对系统输出的测定来估计系统的初始状态? 此即系统的输出量能否反映状态变量,称为状态的能观测性问题.

定义 6.7.1　对于线性时变系统

$$\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{B}(t)\boldsymbol{u}(t) \tag{6.7.22}$$

如果在任意有限时间区间 $[t_0,t_1]$ 内,都存在控制向量 $\boldsymbol{u}(t)$, 能将系统从初始状态 $\boldsymbol{x}(t_0)$ 转移到任意终端状态 $\boldsymbol{x}(t_1)$, 则称此系统是**能控的**.

如何判定系统的能控性呢?

定理 6.7.3　线性时变系统 (6.7.22) 在定义时间区间 $[t_0,t_1]$ 内状态完全能控的充要条件是 Gram 矩阵 $\boldsymbol{W}_c(t_0,t_1)$ 非奇异,其中

$$\boldsymbol{W}_c(t_0,t_1)=\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}(t_0,s)\boldsymbol{B}(s)\,\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}(s)\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(t_0,s)\,\mathrm{d}s$$

称为**能控性矩阵**.

事实上,构造控制向量 $\boldsymbol{u}(t)=-\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}(t)\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(t_0,t)\boldsymbol{W}_c^{-1}(t_0,t_1)\boldsymbol{x}(t_0)$, 则

$$\begin{aligned}\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}(t_1,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s&=\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}(t_1,s)\boldsymbol{B}(s)\,B^{\mathrm{T}}(s)\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(t_0,s)\mathrm{d}s\cdot\boldsymbol{W}_c^{-1}(t_0,t_1)\boldsymbol{x}(t_0)\\&=\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)\boldsymbol{W}_c(t_0,t_1)\cdot\boldsymbol{W}_c^{-1}(t_0,t_1)\boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)\boldsymbol{x}(t_0)\end{aligned}$$

将上式代入式 (6.7.19), 可知

$$\boldsymbol{x}(t_1)=\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)\,\boldsymbol{x}_0+\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}(t_1,s)\boldsymbol{B}(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s=\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)\,\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{\Phi}(t_1,t_0)\,\boldsymbol{x}_0=0$$

这说明任何初始状态 $\boldsymbol{x}(t_0)$ 在时间 $[t_0,t_1]$ 内都可以被转移到零状态.

定理 6.7.3 从理论上给出了线性系统是否完全能控的统一判别准则,但用于实际则要计算状态转移矩阵,则显然存在困难. 特别地,对应线性定常系统,必须寻找更加方便的判别准则.

对于线性定常系统

$$\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(t) \tag{6.7.23}$$

假设 $\boldsymbol{x}(t_1)=0$ 且 $t_0=0$, 则由式 (6.7.8) 可知

$$\boldsymbol{0}=\boldsymbol{x}(t_1)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t_1}\boldsymbol{x}(0)+\int_0^{t_1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t_1-s)}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s$$

从而 $\boldsymbol{x}(0)=-\int_0^{t_1}\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s$. 再由 Cayley-Hamilton 定理,可设 $\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}s}=\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{a}_k(s)\boldsymbol{A}^k$，并令

$$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_p),\ \boldsymbol{\beta}_{kj}=\int_0^{t_1}\boldsymbol{a}_k(s)\,\boldsymbol{u}_j(s)\mathrm{d}s\quad(j=1,2,\cdots,p)$$

则

$$\boldsymbol{x}(0)=-\int_0^{t_1}\Big(\sum_{k=0}^{n-1}a_k(s)\,\boldsymbol{A}^k\Big)\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s=-\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{B}\int_0^{t_1}\boldsymbol{a}_k(s)\boldsymbol{u}(s)\mathrm{d}s$$

$$=-\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{B}\begin{bmatrix}\int_0^{t_1}a_k(s)\boldsymbol{u}_1(s)\mathrm{d}s\\ \int_0^{t_1}a_k(s)\boldsymbol{u}_2(s)\mathrm{d}s\\ \vdots\\ \int_0^{t_1}a_k(s)\boldsymbol{u}_p(s)\mathrm{d}s\end{bmatrix}=-\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{B}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}_{k1}\\ \boldsymbol{\beta}_{k2}\\ \vdots\\ \boldsymbol{\beta}_{kp}\end{bmatrix}$$

$$=-\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{A}^k(\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_p)\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}_{k1}\\ \boldsymbol{\beta}_{k2}\\ \vdots\\ \boldsymbol{\beta}_{kp}\end{bmatrix}=-\sum_{k=0}^{n-1}(\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{b}_1,\cdots,\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{b}_p)\begin{bmatrix}\boldsymbol{\beta}_{k1}\\ \boldsymbol{\beta}_{k2}\\ \vdots\\ \boldsymbol{\beta}_{kp}\end{bmatrix}$$

记 $\boldsymbol{W}_c=(\boldsymbol{b}_1,\ \boldsymbol{b}_2,\cdots,\ \boldsymbol{b}_p,\cdots,\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{b}_2,\cdots\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{b}_p)$，$\tilde{\boldsymbol{u}}=(\boldsymbol{\beta}_{01},\boldsymbol{\beta}_{02},\cdots,\boldsymbol{\beta}_{0p},\cdots,\boldsymbol{\beta}_{n-1,1},\boldsymbol{\beta}_{n-1,2},\cdots,\boldsymbol{\beta}_{n-1,p})^{\mathrm{T}}$，则上式变成了方程组 $\boldsymbol{W}_c\tilde{\boldsymbol{u}}=-\boldsymbol{x}(0)$. 如果其系数矩阵即 $n\times np$ 阶矩阵 $\boldsymbol{W}_c$ 行满秩,则从此方程组可求得控制信号 $\tilde{\boldsymbol{u}}$.

定理 6.7.4　线性定常系统 (6.7.23) 在定义时间区间 $[t_0,t_1]$ 内状态完全能控的充要条件是能控性矩阵 $\boldsymbol{W}_c=(\boldsymbol{B},\boldsymbol{AB},\cdots,\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{B})$ 行满秩.

定义 6.7.2　对于线性时变系统

$$\begin{cases}\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}(t)\boldsymbol{x}(t)\\ \boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{C}(t)\boldsymbol{x}(t)\end{cases}\tag{6.7.24}$$

如果在任意有限时间区间 $[t_0,t_1]$ 内,都能通过观察系统的输出向量 $\boldsymbol{y}(t_1)$ 而唯一地确定系统的初始状态 $\boldsymbol{x}(t_0)$，则称此系统是**能观测的**.

如何判定系统的能观测性呢?

定理 6.7.5　线性时变系统 (6.7.24) 在定义时间区间 $[t_0,t_1]$ 内状态完全能观测的充要条件是 Gram 矩阵 $\boldsymbol{W}_o(t_0,t_1)$ 非奇异,其中

$$\boldsymbol{W}_o(t_0,t_1)=\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(s,t_0)\,\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}(s)\boldsymbol{C}(s)\boldsymbol{\Phi}(s,t_0)\mathrm{d}s$$

被称为能观测性矩阵.

事实上,因为 $\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{x}(t_0)$,所以 $\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{C}(t)\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{C}(t)\boldsymbol{\Phi}(t,t_0)\boldsymbol{x}(t_0)$,从而

$$\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(s,t_0)\,\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}(s)\boldsymbol{y}(s)\mathrm{d}s=\left(\int_{t_0}^{t_1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}(s,t_0)\,\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}(s)\boldsymbol{C}(s)\boldsymbol{\Phi}(s,t_0)\mathrm{d}s\right)\cdot\boldsymbol{x}(t_0)$$

$$=\boldsymbol{W}_o(t_0,t_1)\boldsymbol{x}(t_0)$$

所以,当 $\boldsymbol{W}_o(t_0,t_1)$ 非奇异时可唯一确定 $\boldsymbol{x}(t_0)$.

定理 6.7.5 从理论上给出了线性系统是否完全能观测的统一判别准则,但用于实际也要计算状态转移矩阵,显然也存在困难.对于线性定常系统,也必须寻找更加方便的判别准则.

对于线性定常系统

$$\begin{cases}\boldsymbol{x}'(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)\\ \boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}(t)\end{cases}\tag{6.7.25}$$

假设 $t_0=0$,则 $\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(0)$. 由 Cayley-Hamilton 定理,可设

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{\alpha}_k(t)\,\boldsymbol{A}^k,\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{\alpha}_0(t)\boldsymbol{I},\boldsymbol{\alpha}_1(t)\boldsymbol{I},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1}(t)\boldsymbol{I})$$

从而

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{C}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{C}\left(\sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{\alpha}_k(t)\,\boldsymbol{A}^k\right)\boldsymbol{x}(0)$$

$$=(\boldsymbol{\alpha}_0(t)\boldsymbol{I},\boldsymbol{\alpha}_1(t)\boldsymbol{I},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1}(t)\boldsymbol{I})\begin{pmatrix}\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{CA}\\ \vdots\\ \boldsymbol{CA}^{n-1}\end{pmatrix}\boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{U}\boldsymbol{W}_o\boldsymbol{x}(0)$$

即有方程组 $\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{U}\boldsymbol{W}_o\boldsymbol{x}(0)$,其中 $\boldsymbol{W}_o^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{C},\boldsymbol{CA},\cdots,\boldsymbol{CA}^{n-1})$. 由于矩阵 $\boldsymbol{U}$ 非奇异,因此当矩阵 $\boldsymbol{W}_o$ 列满秩时,由输出向量 $\boldsymbol{y}(t)$ 可得初始状态 $\boldsymbol{x}(0)$.

定理 6.7.6　线性定常系统 (6.7.24) 在定义时间区间 $[t_0,t_1]$ 内状态完全能观测的充要条件是能观测性矩阵 $\boldsymbol{W}_o$ 列满秩,其中

$$\boldsymbol{W}_o=\begin{pmatrix}\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{CA}\\ \vdots\\ \boldsymbol{CA}^{n-1}\end{pmatrix}$$

习 题 六

6.1 用定义 6.1.2 证明定理 6.1.2.

6.2 用定理 6.1.2 证明定理 6.1.3.

6.3 判断下列矩阵是否为收敛矩阵：

(1) $\boldsymbol{A}=\frac{1}{6}\begin{pmatrix}1 & -8\\ -2 & 1\end{pmatrix}$； (2) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.1 & -0.7 & 0.3\\ -0.3 & 0.1 & 0.2\\ 0.4 & 0 & 0.2\end{bmatrix}$.

6.4 问 a 取何值时，矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & a & a\\ a & 0 & a\\ a & a & 0\end{bmatrix}$ 是收敛矩阵?

6.5 判断下列矩阵幂级数的敛散性：

(1) $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^2}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ -1 & -3\end{pmatrix}^k$； (2) $\sum\limits_{k=1}^{\infty}\frac{k}{4^k}\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & 1\end{pmatrix}^k$.

6.6 试求矩阵幂级数 $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\begin{pmatrix}0.2 & 0.7\\ 0.6 & 0.1\end{pmatrix}^k$ 的和.

6.7 $\mathbb{F}^{n\times n}$ 上的 Neumann 级数收敛的充要条件是 $\rho(\boldsymbol{A})<1$.

6.8 证明：$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & -2\end{bmatrix}$ 对 Jacobi 迭代不收敛，但对 Gauss-Seidel 迭代却是收敛的.

6.9 若 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是实对称矩阵，且对角元都为正数，则 Jacobi 迭代收敛的充要条件是 $\boldsymbol{A}>0$ 且 $2\boldsymbol{D}-\boldsymbol{A}>0$.

6.10 若 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的系数矩阵 $\boldsymbol{A}>0$，则 Gauss-Seidel 迭代是收敛的.

6.11 若 $\boldsymbol{A}$ 严格对角占优且且对角元都为正数，则 $\boldsymbol{A}>0$.

6.12 证明定理 6.3.4 的充分性.

6.13 设 $\boldsymbol{A}(t)=\begin{pmatrix}\cos t & -\sin t\\ \sin t & \cos t\end{pmatrix}$，求 $\boldsymbol{A}'(t)$，$[\boldsymbol{A}^{-1}(t)]'$，$|\boldsymbol{A}(t)|'$ 及 $|\boldsymbol{A}'(t)|$.

6.14 设 $\boldsymbol{A}(t)=\begin{pmatrix}t & te^{\mathrm{T}}\\ \cos t & 0\end{pmatrix}$，求 $\int_0^1\boldsymbol{A}(t)\mathrm{d}t$.

6.15 求下列 λ 矩阵的 Smith 标准型，并指出其不变因子、行列式因子和初等因子：

(1) $\boldsymbol{A}(\lambda)=\begin{bmatrix}\lambda^3-\lambda & 2\lambda^2\\ \lambda^2+5\lambda & 3\lambda\end{bmatrix}$； (2) $\boldsymbol{A}(\lambda)=\begin{bmatrix}\lambda^2-1 & 0\\ 0 & (\lambda-1)^3\end{bmatrix}$；

(3) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1-\lambda & \lambda^2 & \lambda\\ \lambda & \lambda & -\lambda\\ 1+\lambda^2 & \lambda^2 & -\lambda^2\end{bmatrix}$.

6.16 已知 5 阶矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的秩为 4，且其初等因子为 $\lambda+1,\lambda+1,(\lambda+1)^2,\lambda-1,(\lambda-1)^2$，求 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 的 Smith 标准型.

6.17 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式,其中

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & -2 & 6\\ -1 & 0 & 3\\ -1 & -1 & 4\end{bmatrix}$;(2) $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_2(1),\boldsymbol{J}_3(1),\boldsymbol{J}_1(2),\boldsymbol{J}_2(2),\boldsymbol{J}_3(3))$.

6.18 证明:矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可对角化的充要条件是 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式没有重根.

6.19 利用上一题的结论证明幂等矩阵一定相似于对角矩阵.

6.20 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,证明:

(1) $\sin^2\boldsymbol{A}+\cos^2\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$;(2) $\sin(\boldsymbol{A}+2\pi i\boldsymbol{I})=\sin\boldsymbol{A}$;(3) $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}+2\pi i\boldsymbol{I}}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$.

6.21 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,证明 $u(\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})\leqslant \mathrm{e}^{u(\boldsymbol{A})}$,其中的范数 $u(\boldsymbol{A})$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的相容矩阵范数.

6.22 证明:$(\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})^{\mathrm{H}}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}}$.

6.23 证明:若 $\boldsymbol{A}$ 为反 Hermite 矩阵(实反对称矩阵),则 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 为酉矩阵(正交矩阵).

6.24 已知 n 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{I}$,求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$、$\sin\boldsymbol{A}$ 和 $\cos\boldsymbol{A}$.

6.25 已知矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}$,求矩阵函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$、$\sin\boldsymbol{A}$、$\cos(\pi\boldsymbol{A})$ 和 $\arctan\dfrac{\boldsymbol{A}}{4}$.

6.26 计算下列矩阵函数:

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 4 & 4\end{pmatrix}$,求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$、$\boldsymbol{A}^{1/2}$ 及 $\ln\boldsymbol{A}$;

(2) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}$,求 $\arctan\boldsymbol{A}$;

(3) $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{J}_2(1),\boldsymbol{J}_3(2))$,求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 及 $\sin\boldsymbol{A}$.

6.27 设 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a & b\\ -b & a\end{pmatrix}$,$a,b\in\mathbb{R}$,求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$. 特别地,当 $a=0$ 且 $b=1$ 时,$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=?$

6.28 已知矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 1 & 0\\ -4 & 3 & 0\\ 1 & 0 & 2\end{bmatrix}$,求可逆矩阵 $\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$,使得 $\boldsymbol{P}_1^{-1}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_1^{-1}\sin\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}_1$ 均为 Jordan 标准型.

6.29 设 $f(\boldsymbol{A})$ 在 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有定义,试证 $f(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 在 $\boldsymbol{A}$ 的谱 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上也有定义,并且 $f(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})=(f(\boldsymbol{A}))^{\mathrm{T}}$.

6.30 设 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 0\\ 1 & 2\end{pmatrix}$,求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$.

6.31 已知 $\sin(\boldsymbol{A}t)=\begin{pmatrix}\sin 5t+\sin t & 2\sin 5t-\sin t\\ \sin 5t-\sin t & 2\sin 5t+\sin t\end{pmatrix}$,求矩阵 $\boldsymbol{A}$.

6.32 设 $\boldsymbol{A}$ 是可逆矩阵,求 $\int_0^1\sin(\boldsymbol{A}t)\mathrm{d}t$.

6.33 当 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 可逆时,证明:

(1) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}\ln|\boldsymbol{A}|=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{T}}$;(2) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}|\boldsymbol{A}^{-1}|=-|\boldsymbol{A}|^{-1}(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{T}}$.

6.34 已知常数 $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和未知矩阵 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n\times m}$，设 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X})$，试求 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X})$.

6.35 设函数矩阵 $\boldsymbol{A}(t)$ 是可积的，证明：

(1) $\left\| \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \right\|_1 \leqslant \int_{t_0}^{t} \|\boldsymbol{A}(s)\|_1 \mathrm{d}s$;

(2) $\left\| \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \right\|_\infty \leqslant \int_{t_0}^{t} \|\boldsymbol{A}(s)\|_\infty \mathrm{d}s$;

(3) $\left\| \int_{t_0}^{t} \boldsymbol{A}(s)\mathrm{d}s \right\|_{m_1} \leqslant \int_{t_0}^{t} \|\boldsymbol{A}(s)\|_{m_1} \mathrm{d}s$.

6.36 线性常系数齐次微分方程组

$$\begin{cases} x_1'(t) = 3x_1 + 8x_3 \\ x_2'(t) = 3x_1 - x_2 + 6x_3 \\ x_3'(t) = -2x_1 - 5x_3 \end{cases}$$

满足初始条件 $(x_1(0), x_2(0), x_3(0))^{\mathrm{T}} = (1,0,1)^{\mathrm{T}}$ 的解.

6.37 求微分方程 $\boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)$ 满足初始条件 $\boldsymbol{x}(0)$ 的解，其中

(1) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 1 \\ 2 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{x}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$；(2) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 3 & -1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{x}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

6.38 求微分方程 $\boldsymbol{x}'(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{b}(t)$ 满足初始条件 $\boldsymbol{x}(0)$ 的解，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & -4 \\ -2 & -4 & 5 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}(t) = \mathrm{e}^{10t}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

6.39 验证 $\sin\boldsymbol{A}(t)$ 和 $\cos\boldsymbol{A}(t)$ 满足二阶矩阵微分方程 $\boldsymbol{X}''(t) + \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{X}(t) = \boldsymbol{O}$，并且当 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，此方程在给定初始条件 $\boldsymbol{X}(0) = \boldsymbol{X}_0, \boldsymbol{X}'(0) = \boldsymbol{X}_1$ 下的解为

$$\boldsymbol{X}(t) = (\cos\boldsymbol{A}(t))\boldsymbol{X}_0 + (\sin\boldsymbol{A}(t))\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{X}_1$$

6.40 为了求解微分方程 $x^{(n)} + a_{n-1}x^{(n-1)} + \cdots + a_1 x = 0$ 的解 $x = x(t)$，令

$$y_1 = x, y_2 = x', y_3 = x'', \cdots, y_{n-1} = x^{(n-2)}, y_n = x^{(n-1)}$$

则原方程变成微分方程组

$$y_1' = y_2, y_2' = y_3, \cdots, y_{n-1}' = y_n, y_n' = -a_{n-1}y_n - \cdots - a_2 y_2 - a_1 y_1$$

利用矩阵技术可求解上述微分方程组，从而求得 y_1 即 $x = x(t)$. 据此，求下列微分方程的通解：

$$x''(t) - 3x'(t) + 2x(t) = 0, \; x(t_0) = c_1, x'(t_0) = c_2$$

第7章 特征值问题

"特征"一词来自德语的 eigen,由希尔伯特在 1904 年首先在这个意义下使用. eigen 一词可翻译为"自身的","特定于……的","有特征的"或者"个体的",这些译法强调了特征对对于定义特定的变换是很重要的,也反映了特征对对于凸显个体"个性"的重要性. 例如人脸识别中的"特征脸"技术,就是将所有面像集合视为一个面像子空间,并基于检测样品即个体面像与其在各子空间的投影之间的距离,从而提取出个体面像的代数特征,进而作为人脸识别的依据.

如今特征值问题早已成为线性代数的研究重点,在理论和应用上都非常重要. 理论上 ,矩阵的特征值就是线性算子的谱,因此可从泛函分析里找到理论的支撑和生长点. 应用上,结构动力分析、信号处理、图像处理、模式识别等学科中经常需要求解特征值问题,Google 的 PageRank 算法更是成了最有价值的应用. 另外,微分方程中的许多问题都可以转化为矩阵特征值问题.

7.1 特征值的估计

由于工程计算中求矩阵尤其是高阶矩阵的精确特征值通常比较困难,而许多情况下我们只需要知道特征值在什么范围内变化或者落在什么区域内,例如判断方阵的幂级数是否收敛只要看方阵的特征值的模或谱半径是否小于 1,因此特征值的估计就显得尤其必要,这方面的理论在特征值问题中相当经典.

7.1.1 从特征值问题的稳定性说起

工程计算中,求解特征值问题

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$$

的特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 时,由于数据往往带有误差,因此我们计算出的特征对 $(\widetilde{\lambda},\widetilde{\boldsymbol{x}})$, 一般与 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 不相同,但可以看成是将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 扰动成 $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ 之后的特征值问题

$$\widetilde{\boldsymbol{A}}\widetilde{\boldsymbol{x}}=\widetilde{\lambda}\widetilde{\boldsymbol{x}}$$

的解,其中扰动为 $\boldsymbol{E}=\widetilde{\boldsymbol{A}}-\boldsymbol{A}=(\varepsilon_{ij})$. 正如第 1 章已指出的,这种研究思路就是向后误差分析法.

最理想的状态当然是扰动 $\boldsymbol{E}$ 对特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 影响不大，即相应的特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 是稳定的. 进一步地，我们还希望知道矩阵元素尤其是特定位置的矩阵元素的变化对特征对的影响. 由于一般只知道 $|\varepsilon_{ij}|$ 或 $\|\boldsymbol{E}\|$ 的某个上界，因此有必要研究如何利用这样的上界，以尽可能准确地估计 λ 与 $\tilde{\lambda}$ 以及 $\boldsymbol{x}$ 与 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 之间的差距，从而可确定特征值问题的稳定性.

由于矩阵特征多项式的系数是矩阵元素的连续函数，而特征多项式的根又都是其系数的连续函数，因此矩阵的特征值作为特征多项式的零点都连续地依赖于矩阵的元素. 这就意味着矩阵元素连续变化必然导致对应特征值的连续变化.

奥斯特洛斯基(Ostrowski)1957 年给出了特征值的这种连续性的定量分析，结果如下：

定理 7.1.1 设矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n},\boldsymbol{B}=(b_{ij})_{n\times n}$ 的特征值分别为 $\lambda_i,\mu_i\ (i=1,2,\cdots,n)$. 令

$$\delta=(n+2)\cdot\left[\max_{i,j}(|a_{ij}|,|b_{ij}|)\right]^{1-\frac{1}{n}}\cdot\left(\frac{1}{n}\|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\|_{m_1}\right)^{\frac{1}{n}} \tag{7.1.1}$$

则：(1)对 $\boldsymbol{A}$ 的任意特征值 λ_i，存在(未必唯一) $\boldsymbol{B}$ 的特征值 μ_j，使得 $|\lambda_i-\mu_j|<\delta$；

(2)存在 $1,\cdots,n$ 的排列 $\pi(1),\cdots,\pi(n)$，使得 $|\lambda_i-\mu_{\pi(i)}|<(2n-1)\delta$.

证明：请参见文献[40].

定理 7.1.1 说明，当 $\boldsymbol{B}\to\boldsymbol{A}$ 时，存在 $1,\cdots,n$ 的一个固定的排列 π，使得 $\mu_{\pi(i)}\to\lambda_i$，因此矩阵的特征值连续地依赖于矩阵元素.

遗憾的是，矩阵的特征向量一般不是矩阵元素的连续函数，因此不一定是稳定的. 请看下例.

例 7.1.1 函数矩阵 $\boldsymbol{A}(\varepsilon)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1+\varepsilon&1\\\varepsilon&0&1+\varepsilon\end{pmatrix}$ 的特征值为 $1+\varepsilon$（二重)和 1，特征向量为 $(0,1,0)^{\mathrm T}$ 和 $(1,1/\varepsilon,-1)^{\mathrm T}$. 而矩阵 $\boldsymbol{A}(0)$ 的特征值为 1（三重)，特征向量为 $(0,1,0)^{\mathrm T}$ 和 $(1,0,0)^{\mathrm T}$. 显然，当 $\varepsilon\to0$ 时 $(1,1/\varepsilon,-1)^{\mathrm T}\to(1,0,0)^{\mathrm T}$ 不成立，因此函数矩阵 $A(\varepsilon)$ 的特征向量在 $\varepsilon=0$ 处不连续.

7.1.2 盖尔定理

把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分裂成 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}+\boldsymbol{B}$，其中 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(a_{11},\cdots,a_{nn})$，构造 $\boldsymbol{A}$ 的扰动矩阵 $\boldsymbol{A}(\varepsilon)=\boldsymbol{D}+\varepsilon\boldsymbol{B}$，显然，$\boldsymbol{A}(0)=\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{A}(1)=\boldsymbol{A}$.

我们有理由猜测，如果 ε 足够小，函数矩阵 $\boldsymbol{A}(\varepsilon)$ 的特征值将位于矩阵 $\boldsymbol{A}(0)$ 的特征值（即 $\boldsymbol{A}$ 的对角元 $a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn}$）的某些小邻域内. 盖尔圆就是刻画这些小邻域的一种方式.

定义 7.1.1 对方阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，称

$$\{z\in\mathbb{C}\mid|z-a_{ii}|\leqslant R_i\}\quad(i=1,\cdots,n) \tag{7.1.2}$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**行盖尔(Gerschgorin)圆**，记为 $G_i(\boldsymbol{A})$，并称并集 $\bigcup_{i=1}^{n}G_i(A)$ 为矩阵 A 的**行盖尔**

区域,其中 $R_i = \sum_{j=1,j\neq i}^{n} |a_{ij}|$. 类似地,可定义矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**列盖尔圆**和**行盖尔区域**.

按前述思想,矩阵特征值应该位于盖尔圆之内,此即下述盖尔定理.

定理 7.1.2　(**Gerschgorin**)对方阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, 成立:

(1)矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值都位于其行盖尔区域内;

(2)若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有行盖尔圆中,有 m 个行盖尔圆构成的并集 G 是连通区域(即区域内任何两点都可以用区域内的折线段连接起来),并且与其余 $n-m$ 个行盖尔圆均不相交,则 G 中恰好有 $\boldsymbol{A}$ 的 m 个特征值.

证明:(1)设 $\boldsymbol{A}$ 有特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$, 这里 $\boldsymbol{x} = (x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$, 则

$$\sum_{k=1}^{n} a_{jk}x_k = \lambda x_j \quad (j = 1,\cdots,n)$$

令 $|x_p| = \max\limits_{j}|x_j|$, 则 $|x_p| \neq 0$(否则 $\boldsymbol{x}$ 为零向量,与 $\boldsymbol{x}$ 是特征向量相矛盾),因此

$$\begin{aligned}|\lambda - a_{pp}|\cdot|x_p| &= \Big|\sum_{k=1,k\neq p}^{n} a_{pk}x_k\Big| \leqslant \sum_{k=1,k\neq p}^{n} |a_{pk}|\cdot|x_k| \\ &\leqslant |x_p|\sum_{k=1,k\neq p}^{n}|a_{pk}| = |x_p|R_p\end{aligned}$$

从而 $|\lambda - a_{pp}| \leqslant R_p$.

(2)假设 $\boldsymbol{A}$ 的前 m 个行盖尔圆构成连通区域 G, 且与后 $n-m$ 个盖尔圆分离. 由(1)可知

$$\sigma(\boldsymbol{A}(\varepsilon)) \subset \bigcup_{i=1}^{n} G_i(\boldsymbol{A}(\varepsilon))$$

并且

$$G_i(\boldsymbol{A}(\varepsilon)) \subset G_i(\boldsymbol{A}),\ G_i(\boldsymbol{A}(0)) = G_i(\boldsymbol{D}) = a_{ii},\ G_i(\boldsymbol{A}(1)) = G_i(\boldsymbol{A}) \quad (i = 1,\cdots,n) \tag{7.1.3}$$

根据定理 7.1.1,显然 $\boldsymbol{A}(\varepsilon)$ 的每个特征值 $\lambda_i(\varepsilon)$ 都连续地依赖于 $\varepsilon \in [0,1]$, 因此,当 ε 从 0 变化到 1 时,每个 $\lambda_i(\varepsilon)$ 表示了 $\mathbb{C}$ 中的一条始点为 $\lambda_i(0) = a_{ii}$、终点为 $\lambda_i(1) = \lambda_i$ 的连续曲线. 而且当 ε 连续变化时, $\boldsymbol{A}(\varepsilon)$ 的前 m 个行盖尔圆始终与后 $n-m$ 个行盖尔圆分离. 因此,以 $a_{11},a_{22},\cdots,a_{mm}$ 为始点的 m 条连续曲线 $\lambda_1(\varepsilon),\lambda_2(\varepsilon),\cdots,\lambda_m(\varepsilon)$ 全部位于此时的 $G = \bigcup_{i=1}^{m} G_i(A)$ 之中,所以它们的终点 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m$ 也位于 G 之中. 同理可证, G 中不含剩余的连续曲线 $\lambda_{m+1}(\varepsilon),\lambda_{m+2}(\varepsilon),\cdots,\lambda_n(\varepsilon)$, 因此也不含它们的终点 $\lambda_{m+1},\lambda_{m+2},\cdots,\lambda_n$. 证毕.

注意:盖尔定理并没有明确指明每个行盖尔圆内一定有且仅有一个特征值. 另外,因为转置矩阵不改变特征值,所以盖尔定理对列盖尔圆也同样成立.

ATLAST 程序包中提供了函数 gersch,可用于绘制盖尔圆,其调用格式为

```
gersch(A,eigplot,color)
```

其中,后两个参数可以使用缺省值.

例 7.1.2 矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}20 & 5 & 0.8\\ 4 & 10 & 1\\ 1 & 2 & 10i\end{pmatrix}$ 的三个行盖尔圆分别是(如图 7-1 所示):

$$G_1(\boldsymbol{A})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-20|\leqslant 5.8\}$$

$$G_2(\boldsymbol{A})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-10|\leqslant 5\}$$

$$G_3(\boldsymbol{A})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-10i|\leqslant 3\}$$

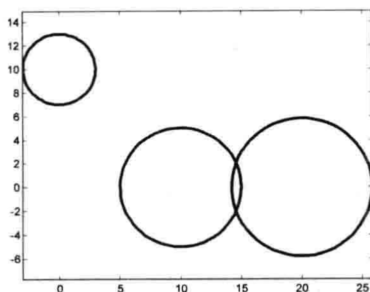


图 7-1 三个盖尔圆

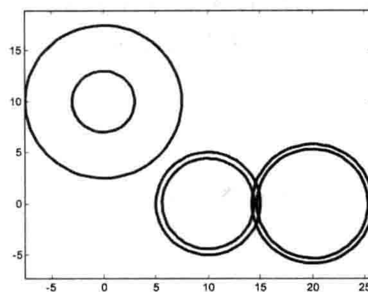


图 7-2 隔离后的盖尔圆

在图 7-1 中,注意到 $G_1(\boldsymbol{A})$ 与 $G_2(\boldsymbol{A})$ 有重叠,而我们希望每个盖尔圆内有唯一的特征值,因此必须收缩这两个盖尔圆的半径. 这种收缩最好不要改变考矩阵的特征值,因此可考虑相似变换. 在文献[87]中,威尔金森指出,为了得到特征值的更加准确的估计,可以通过相似变换矩阵 D, 将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 相似变换为矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{DAD}^{-1}$, 以缩小盖尔圆的半径,达到隔离盖尔圆的目的,如图 7-2 所示. 实际中为计算方便,常常取 $\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵. 当然威尔金森当初的做法,是先将矩阵变换成 Jordan 标准型,再用盖尔定理和对角相似变换,对不同特征值结构的特征值问题进行了细致的扰动分析.

设 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$ 且 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$ 的元素全为正数,其中 $d_i\neq 1$ 且剩余的 $d_j=1$, $j\neq i$, 则矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{DAD}^{-1}$ (注意不是 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{AD}$)的 n 个行盖尔圆半径为

$$\widetilde{R}_i=\sum_{j=1,j\neq i}^{n}\left|a_{ij}\frac{d_i}{d_j}\right|=d_i\sum_{j=1,j\neq i}^{n}|a_{ij}|\frac{1}{d_j}=d_iR_i \tag{7.1.4}$$

$$\widetilde{R}_k=\sum_{j=1,j\neq k}^{n}\left|a_{kj}\frac{d_k}{d_j}\right|=d_k\sum_{j=1,j\neq k}^{n}|a_{kj}|\frac{1}{d_j}=R_k+(\frac{1}{d_i}-1)|a_{ki}|\quad(k=1,2,\cdots,n,k\neq i) \tag{7.1.5}$$

由式(7.1.4)和式(7.1.5)可知,当 $d_i<1$ 时, $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个行盖尔圆半径缩小,同时,其余的 $n-1$ 个行盖尔圆半径都增大;当 $d_i>1$ 时, $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个行盖尔圆半径增大,同时,其余的 $n-1$ 个行盖尔圆半径都缩小. 故对图 7-1 而言,应增大 $G_3(\boldsymbol{A})$ 的半径,这样就能缩小 $G_1(\boldsymbol{A})$ 与 $G_2(\boldsymbol{A})$ 的半径.

例 7.1.3 矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}20 & 5 & 0.8\\ 4 & 10 & 1\\ 1 & 2 & 10i\end{pmatrix}$ 经过对角相似变换 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(1,1,2.5)$ 后,得

$$
\boldsymbol{B}=\boldsymbol{DAD}^{-1}=\begin{bmatrix} 20 & 5 & 0.32 \\ 4 & 10 & 0.4 \\ 2.5 & 5 & 10i \end{bmatrix}
$$

$\boldsymbol{A}$ 的三个行盖尔圆分别收缩为(图 7 - 2)：

$$
G_1{}'(\boldsymbol{B})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-20|\leqslant 5.32\}
$$
$$
G_2{}'(\boldsymbol{B})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-10|\leqslant 4.4\}
$$
$$
G_3{}'(\boldsymbol{B})=\{z\in\mathbb{C}\mid |z-10i|\leqslant 7.5\}
$$

盖尔圆显然让我们联想到行对角占优矩阵. 事实上，盖尔定理与对角占优矩阵确实有着密切关系. 我们在定理 6.2.4 中已经证明命题“严格对角占优矩阵都是可逆矩阵”是正确的，故当 $\boldsymbol{A}$ 是严格对角占优矩阵时，$\boldsymbol{A}$ 没有零特征值，而且满足

$$
|0-a_{ii}|=|a_{ii}|>R_i \quad (i=1,2,\cdots,n)
$$

这说明矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ 应该满足

$$
|\lambda-a_{ii}|\leqslant R_i \quad (i=1,2,\cdots,n)
$$

由此，我们可以将盖尔定理看成上述命题的“推论”.

事实上，若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的某个特征值 λ 不属于 $\boldsymbol{A}$ 的盖尔区域，则有

$$
|\lambda-a_{ii}|>R_i \quad (i=1,2,\cdots,n)
$$

因此，矩阵 $\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ 是严格对角占优的，根据上述命题，$\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\neq 0$，这显然与 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值相矛盾.

仅仅对矩阵元素进行简单的算术运算，就能够估计矩阵的特征值，盖尔定理的这种简洁性和优美性吸引了许多数学家，从而催生了数百篇相关论文. 给出盖尔定理这个强大工具的，就是苏联数学家盖尔(Semyon Aranovich Gerschgorin，见图 7 - 3).



图 7 - 3　盖尔(1900—1931)

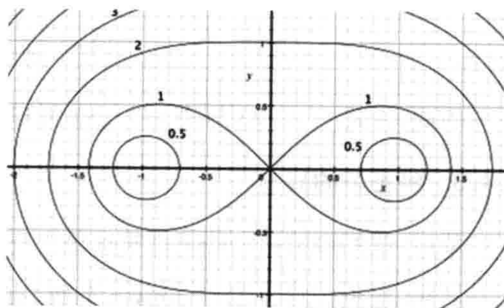


图 7 - 4　Cassini 卵形

盖尔 1923 年起就读于彼得格勒技术学院力学系，期间发表多篇论文，涉及弹性理论、振动理论、微分方程的近似数值积分法等领域，因此他 1930 就被聘为列宁格勒机械工程学院教授. 1931 年，他发表“关于矩阵特征值的极限”(德文版)一文，给出了盖尔定理. 然而，高强度和高压力的工作使得他的身体极度虚弱，当年竟突发重病溘然辞世，年

仅 31 岁.

盖尔圆也激励了布劳尔(Alfred Brauer). 作为盖尔定理的推广,他于 1947 年发现优美的 Cassini 卵形(如图 7-4 所示)也可以用于估计特征值.

定理 7.1.3 (**Brauer**)方阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 的任意特征值 λ 都位于 $\frac{n(n-1)}{2}$ 个 Cassini 卵形(oval)的并集 B 内,即

$$\lambda\in B=\bigcup_{i,j=1,i\neq j}^{n}\{z\in\mathbb{C}\mid |z-a_{ii}|\cdot|z-a_{jj}|\leqslant R_iR_j\}\tag{7.1.6}$$

证明:定理的证明与盖尔定理类似,区别仅在于要选择两个最大模分量.

设 $\boldsymbol{A}$ 有特征对 $(\lambda,\boldsymbol{x})$, 这里 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$. 令 $|x_p|=\max\limits_j|x_j|$, 则 $x_p\neq 0$. 如果 $\boldsymbol{x}$ 的其他分量都是零,则由 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 可知 $a_{pp}=\lambda$, 由于此时 $a_{pp}\in B$, 因此 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda\in B$.

如果 $\boldsymbol{x}$ 至少有两个非零分量,不妨设第二个绝对值最大的分量为 x_q, 则由 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 可知

$$x_p(\lambda-a_{pp})=\sum_{k=1,k\neq p}^{n}a_{pk}x_k$$

从而

$$|\lambda-a_{pp}|\cdot|x_p|=\left|\sum_{k=1,k\neq p}^{n}a_{pk}x_k\right|\leqslant\sum_{k=1,k\neq p}^{n}|a_{pk}|\cdot|x_k|\leqslant|x_q|\sum_{k=1,k\neq p}^{n}|a_{pk}|=|x_q|R_p$$

此即

$$|\lambda-a_{pp}|\leqslant R_p\frac{|x_q|}{|x_p|}\tag{7.1.7}$$

同理可知

$$|\lambda-a_{qq}|\leqslant R_q\frac{|x_p|}{|x_q|}\tag{7.1.8}$$

因此,由式(7.1.7)与式(7.1.8)可知 $|\lambda-a_{pp}||\lambda-a_{qq}|\leqslant R_qR_p$, 即 $\lambda\in B$. 证毕.

7.1.3 特征值的界

最后,我们再给出一些估计特征值上界的方法.

首先,根据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Cartesian 分解,有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C}$, 这里 $\boldsymbol{B}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 是 Hermite 矩阵, $\boldsymbol{C}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 是反 Hermite 矩阵. 众所周知,如果 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{O}$, 则 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵,特征值全为实数. 当 $\boldsymbol{C}$ 的元素在 0 附近变化时, $\boldsymbol{A}$ 的特征值会出现复数,因此矩阵 $\boldsymbol{C}$ 可用于确定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值虚部的变化范围.

定理 7.1.4 (**Schur**) 设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$. $\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 同前,则

(1) $|\lambda_1|^2+\cdots+|\lambda_n|^2\leqslant\|\boldsymbol{A}\|_F^2$;

(2) $|\mathrm{Re}(\lambda_1)|^2+\cdots+|\mathrm{Re}(\lambda_n)|^2\leqslant\|\boldsymbol{B}\|_F^2$;

(3) $|\mathrm{Im}(\lambda_1)|^2+\cdots+|\mathrm{Im}(\lambda_n)|^2\leqslant\|\boldsymbol{C}\|_F^2$.

并且,当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵时,等号成立.

证明:(1)设 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}}$,其中上三角阵 $\boldsymbol{T}=(t_{rs})_{n\times n}$ 的主对角元显然就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,于是根据 F 范数的酉不变性,有

$$\|\boldsymbol{A}\|_F^2=\|\boldsymbol{UTU}^{\mathrm{H}}\|_F^2=\|\boldsymbol{T}\|_F^2=\sum_{i=1}^n|\lambda_i|^2+\sum_{r<s}|t_{rs}|^2\geqslant\sum_{i=1}^n|\lambda_i|^2$$

(2)由于 $\boldsymbol{B}=\dfrac{1}{2}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{T}+\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$, 因此

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{B}\|_F^2&=\left\|\frac{1}{2}(\boldsymbol{T}+\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}})\right\|_F^2=\sum_{i=1}^n\left|\frac{1}{2}(\lambda_i+\bar{\lambda}_i)\right|^2+\sum_{r\neq s}^n\left|\frac{1}{2}(t_{rs}+\bar{t}_{sr})\right|^2\\&=\sum_{i=1}^n|\mathrm{Re}(\lambda_i)|^2+\frac{1}{2}\sum_{r<s}|t_{rs}|^2\geqslant\sum_{i=1}^n|\mathrm{Re}(\lambda_i)|^2\end{aligned}$$

(3)的证明与(2)类似,留作练习.

在上述证明中,当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵时,上三角阵 $\boldsymbol{T}$ 为对角矩阵,即 $t_{rs}=0\ (r<s)$,因此等号都成立. 证毕.

推论 7.1.1 (Hirsch) 对 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 的任意特征值 λ, 有

(1) $|\lambda|\leqslant n\cdot\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}|$;

(2) $|\mathrm{Re}(\lambda)|\leqslant\dfrac{n}{2}\cdot\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}+\bar{a}_{ji}|$;

(3) $|\mathrm{Im}(\lambda)|\leqslant\dfrac{n}{2}\cdot\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}+\bar{a}_{ji}|$.

证明:(1) $|\lambda|^2\leqslant\sum\limits_{i=1}^n|\lambda_i|^2=\|\boldsymbol{A}\|_F^2=\sum\limits_{i=1}^n\sum\limits_{j=1}^n|a_{ij}|^2\leqslant n^2\cdot(\max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n}|a_{ij}|)^2$, 结论得证.

其余的请读者自己动手试试. 证毕.

例 7.1.4 矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}20&5&0.8\\4&10&1\\1&2&10i\end{pmatrix}$ 按推论 7.1.1 所得特征值的变化范围为带型区域:

$$\{z\,|\,|z|\leqslant 60\}\cap\{z\,|\,|\mathrm{Re}(z)|\leqslant 60,|\mathrm{Im}(z)|\leqslant 30\}$$

与前两例相比,这个结果比相应的盖尔圆大得多,因此这种估计方法比盖尔定理差.

7.2 多项式特征值问题

标准特征值问题(standard eigenvalue problem,SEP):

$$\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$$

可变形为

$$\boldsymbol{S}(\lambda)\boldsymbol{x} = (-\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

其中，$\boldsymbol{S}(\lambda) = -\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{I}$ 为 λ 矩阵，其对角元是关于 λ 的一次多项式，并且一次项系数都为 1.

按此视角，**广义特征值问题**(generalized eigenproblem，GEP)：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$$

即为

$$\boldsymbol{G}(\lambda)\boldsymbol{x} = (-\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{B})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

其中，λ 矩阵 $\boldsymbol{G}(\lambda) = -\boldsymbol{A} + \lambda\boldsymbol{B}$ 的元素是关于 λ 的一次多项式，并且当 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$ 时 GEP 退化为 SEP.

遵循历史习惯，我们称 λ 矩阵 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 为**矩阵束**(matrix pencil)，记作 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$，因为当 λ 变动时，一系列矩阵 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 在矩阵空间里形成了"直线"，仿佛光束或铅笔(pencil).

类似地，我们有**二次特征值问题**(quadratic eigenproblem，QEP)：

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)\boldsymbol{x} = (\lambda^2\boldsymbol{M} + \lambda\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

这里，λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为 λ 的二次矩阵多项式，其元素都是关于 λ 的二次多项式.

推广到 λ 的三次矩阵多项式，则有**三次特征值问题**(cubic eigenproblem，CEP)：

$$\boldsymbol{C}(\lambda)\boldsymbol{x} = (\lambda^3\boldsymbol{A}_3 + \lambda^2\boldsymbol{A}_2 + \lambda\boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_0)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

更一般地，推广到 λ 的 l 次矩阵多项式，可得**多项式特征值问题**(polynomial eigenproblem，PEP)：

$$\boldsymbol{P}(\lambda)x = (\lambda^l\boldsymbol{A}_l + \cdots + \lambda\boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_0)x = \boldsymbol{0}$$

显然，当 $l = 2,3$ 时 PEP 分别退化为 QEP 和 CEP.

如果进一步将 λ 矩阵的元素推广为非线性函数，我们就有了**非线性特征值问题**(nonlinear eigenproblem，NEP)：

$$\boldsymbol{T}(\lambda)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

这里，$\boldsymbol{T}(\lambda)$ 的元素是关于 λ 的非线性函数.

由于二次多项式已经不是线性函数，因此一般将 QEP、CEP 等 PEP 看成特殊的 NEP，也就是说，QEP 是最特殊的 NEP. 在当前的 NEP 研究中，PEP 是热点. 此外，对一般意义下的 NEP，目前的主要算法基于的都是求解非线性方程组的 Newton 法及其变体，理论和算法都不成熟.

7.2.1 广义特征值问题

在 GEP 中，我们称 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 为**广义特征方程**(generalized characteristic equation)，称 $p(\lambda) = |\lambda\boldsymbol{B} - \boldsymbol{A}|$ 为**广义特征多项式**(generalized characteristic polynomial)，并称满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 的复数 λ 为**广义特征值**(generalized eigenvalue)，记为 $\lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 或简记为 λ.

显然，$p(\lambda)$ 的次数 $d \leqslant n$，其根 λ 称为矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的有限特征值. 当 $d < n$ 时，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 有 $n-d$ 个无穷特征值. 例如 $\boldsymbol{A} = \mathrm{diag}(1,1,0)$，$\boldsymbol{B} = \mathrm{diag}(2,0,1)$ 时，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的特征值为 0.5，0 和 ∞.

当 λ 是有限特征值时，我们称满足 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{Bx}$ 的非零向量 $\boldsymbol{x}$ 为特征值 λ 的(**右**)**广义特征向量**(right generalized eigenvector)，称 $(\lambda,\boldsymbol{x})$ 为**广义特征对**(generalized eigenpair)，称满足 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$ 的非零向量 $\boldsymbol{y}$ 为特征值 λ 的(**左**)**广义特征向量**(left generalized eigenvector)，称 $(\lambda,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 为 GEP 的**特征三元组**(eigentriple). 特别要注意，不要将这里定义的广义特征向量与 Jordan 标准型中出现的广义特征向量相混淆.

当 λ 是无穷特征值时，称满足 $\boldsymbol{Bx} = \boldsymbol{0}$ 的非零向量 $\boldsymbol{x}$ 为特征值 λ 的(右)广义特征向量，称满足 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}$ 的非零向量 $\boldsymbol{y}$ 为特征值 λ 的(左)广义特征向量.

同 SEP 的情形类似，GEP 也未必存在 n 个线性无关的特征向量，即可能存在亏损特征值. 特征值是亏损的，或者特征值是复数，当初在 SEP 中就极大地增加了问题的难度，更何况 GEP 中还可能会出现无穷特征值. 这些情况的存在，无论是理论上还是算法上，都极大地增加了 GEP 的复杂程度.

同 SEP 类似，GEP 也存在等价变换. 设 $\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}$ 是可逆矩阵，则矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 可通过等价变换 $\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}$ 转化成矩阵束 $(\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{B}})$，这里 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AX}$，$\hat{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BX}$. 显然 $(\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{B}})$ 与 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的特征值相同，并且 $(\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{B}})$ 的相应特征向量是 $\hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{x}$，$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{Y}^{-1}\boldsymbol{y}$.

无论是理论上还是实际中，经常要处理的是**正定矩阵束**(definite matrix pencil) $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的特征值问题，这里 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{B}$ 且 $\boldsymbol{B} > 0$. 显然，此时 $p(\lambda)$ 的次数 $d = n$，因此 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 没有无穷特征值，而且 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值全为实数，故可对这些特征值进行排序. 事实上，由于 $\boldsymbol{B} > 0$，故存在可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$，使得 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}$，因此 $\boldsymbol{Q}^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{AQ}^{-1}\boldsymbol{Qx} = \lambda\boldsymbol{Qx}$. 记 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{Q}^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{AQ}^{-1}$，$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Qx}$，即得 $\boldsymbol{Sy} = \lambda\boldsymbol{y}$. 由于 $\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{S}$，故 λ 都是实数.

同时，对 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{Bx}$ 两边共轭转置，可得 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$，即 $\boldsymbol{x}$ 也是特征值 λ 的左广义特征向量. 特别地，当 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 都是实矩阵时，特征值 λ 对应的 $\boldsymbol{x}$ 也是实向量. 同 SEP 类似，我们也可以适当选取这些 $\boldsymbol{x}$，使得 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)_{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}_j = \delta_{ij}$，即它们关于正定 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 正交. 因此正定矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的特征对 $(\lambda_i,\boldsymbol{x}_i)$ 满足

$$\boldsymbol{Ax}_i = \lambda_i\boldsymbol{Bx}_i,\ \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}_j = \delta_{ij}\quad (i,j = 1,2,\cdots,n) \tag{7.2.1}$$

也就是

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}_j = \lambda_i\delta_{ij},\ \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}_j = \delta_{ij}\quad (i,j = 1,2,\cdots,n)$$

这说明广义特征向量对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 加权正交，即 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)_{\boldsymbol{A}} = 0\ (i \neq j)$ 且 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_i)_{\boldsymbol{A}} = \lambda_i\ (i = j)$，对矩阵 $\boldsymbol{B}$ 不仅加权正交，而且模已规范化，即 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)_{\boldsymbol{B}} = 0\ (i \neq j)$ 且 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_i)_{\boldsymbol{B}} = 1\ (i = j)$.

若记 $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$，$\boldsymbol{\Lambda} = (\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，则式 (7.2.1) 也可写成

$$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{BX\Lambda},\ \boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BX} = \boldsymbol{I} \tag{7.2.2}$$

另外，由于 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 两两 $\boldsymbol{B}$ 正交，因此它们也可以看成 $\mathbb{C}^n$ 的一组基，此时对任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$，显然有如下的展开定理：

$$\boldsymbol{x} = \alpha_1\boldsymbol{x}_1 + \alpha_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + \alpha_n\boldsymbol{x}_n$$

其中的系数

$$\alpha_i = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)_{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B} \boldsymbol{x} \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

对正定矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$，等价变换也特殊为合同变换，即可令 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$，$\hat{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}$. 这显然相当于 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}$ 的情形. 由于 $\hat{\boldsymbol{A}}$，$\hat{\boldsymbol{B}}$ 仍然是 Hermite 矩阵，并且 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 还是正定的，因此 $(\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}})$ 仍然是正定矩阵束. 特别地，由式 (7.2.2) 可知，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}$，即

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\Lambda}, \quad \boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{I} \tag{7.2.3}$$

这就是说正定矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 与正定矩阵束 $(\boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{I})$ 是合同的，即两矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 可同时合同对角化.

实际上，式 (7.2.3) 中实现同时合同对角化的矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可放宽为可逆矩阵.

例 7.2.1　**(同时合同对角化)** 对正定矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的特征值问题，存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\Lambda}, \quad \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$$

这里，$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 的对角元都是实数，且都是广义特征值.

证明: 由于 $\boldsymbol{B} > 0$，所以存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}_1$，使得 $\boldsymbol{P}_1^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_1 = I$. 又 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$，因此 $(\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1)^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1$，此即 $\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1$ 也是 Hermite 矩阵，故 $\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1$ 酉相似于对角阵，即存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 及实对角阵 $\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，使得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Lambda}$. 令 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{U}$，则 $\boldsymbol{P}$ 可逆，并且

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Lambda}, \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$$

另外，由第二式可得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{B}\boldsymbol{P})^{-1}$，代入第一式，得 $\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$，这说明 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ 是 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ 的特征值，因此也是广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 的特征值. 证毕.

对于大型稀疏矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 的 GEP，当仁不让的仍然是投影类方法. 这是一片浩瀚的海洋. 限于篇幅，本书略去不谈. 至于稠密或低阶矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 的 GEP，理论上可采用等价变换将 GEP 转化为 SEP，同时保持变换前后的特征向量相同或存在线性关系. 进而通过求解 SEP，解出变换前的 GEP. 这类方法可统称为**谱变换**(spectral transformation)方法. 下面我们对之进行深入分析.

1. Cholesky 分解法

对正定矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的特征值问题，由于 $\boldsymbol{B} > 0$，故有 Cholesky 分解 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$，从而 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$，即

$$(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}})(\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}) = \lambda(\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}), (\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}) = \lambda(\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y})^{\mathrm{H}}$$

令 $\breve{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}, \breve{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}, \breve{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$，则得

$$\breve{\boldsymbol{A}}\breve{\boldsymbol{x}} = \lambda\breve{\boldsymbol{x}}, \breve{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{H}}\breve{\boldsymbol{A}} = \lambda\breve{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{H}} \tag{7.2.4}$$

显然，算出 $\breve{\boldsymbol{A}}$ 的特征三元组 $(\lambda, \breve{\boldsymbol{x}}, \breve{\boldsymbol{y}})$ 后，就可得到原 GEP 的广义特征三元组 $(\lambda, \boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}\breve{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}\breve{\boldsymbol{y}})$.

值得欣喜的是，矩阵 $\breve{\boldsymbol{A}}$ 仍然是 Hermite 矩阵，因此 Cholesky 分解法是一种保结构算

法. 但 Cholesky 分解法要求矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 是正则的,这却极大地限定了它的适用范围. 另外,尽管 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角矩阵,但 $\breve{\boldsymbol{A}}$ 却未必是稀疏的,这使得我们在处理相应的 SEP 时,似乎享受不到三角分解的好处. 当然,在实际问题中,我们一般不会直接求矩阵 $\breve{\boldsymbol{A}}$,而是代之以计算诸如 $\boldsymbol{r}=\breve{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{q}$ 这样的矩阵向量积.

2. 直接求逆法

当矩阵 $\boldsymbol{B}$ 可逆时,显然广义特征值问题

$$\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx},\quad \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$$

等价于下面的标准特征值问题:

$$(\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x},\quad \breve{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A})=\lambda\,\breve{\boldsymbol{y}}^{\mathrm{H}} \tag{7.2.5}$$

其中, $\breve{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$, 或者等价于

$$(\boldsymbol{AB}^{-1})\breve{\boldsymbol{x}}=\lambda\breve{\boldsymbol{x}},\quad \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{AB}^{-1})=\lambda\,\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}} \tag{7.2.6}$$

其中, $\breve{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{Bx}$.

直接求逆法的优点是特征向量不变或存在线性关系,但缺点是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 奇异时不能使用,并且当矩阵 $\boldsymbol{B}>0$ 时,矩阵 $\boldsymbol{T}_I=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ 或 $\boldsymbol{T}_I=\boldsymbol{AB}^{-1}$ 一般不再是对称矩阵,即直接求逆法不是保结构的算法,这就使得相应 SEP 的计算变得十分复杂.

3. 位移求逆法

当矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 都是奇异的,或者矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是病态矩阵时,显然无法使用式(7.2.4)、式(7.2.5)或式(7.2.6),此时一种常见的处理方式是通过适当选择位移(shift)或极点(pole) μ, 再通过直接求逆法,将之转化为 SEP:

$$\boldsymbol{T}_{SI}\boldsymbol{x}=\tau\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}_{SI}=\tau\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}$$

这里, $\boldsymbol{T}_{SI}=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}$, $\tau=(\lambda-\mu)^{-1}$, $\boldsymbol{z}=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$. 显然,算出 $\boldsymbol{T}$ 的特征三元组 $(\tau,\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$ 后,就可得到原 GEP 的广义特征值 $\lambda=\mu+\tau^{-1}$ 及相应的广义特征向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{z}$.

位移求逆法(shift-and-invert,SI)的优点是特征向量不变或存在线性关系,矩阵 $\boldsymbol{B}$ 奇异时也可以使用,并且在求解邻近 μ 的特征值或绝对值很小的特征值时效率较高,因为通过特征值的倒数变换,原来靠得很近的特征值可以得到很好的分离;缺点仍然是 $\boldsymbol{T}_{SI}$ 一般不是特殊矩阵.

4. Cayley 变换法

如果已经得到 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=0$ 的特征值 λ 的近似值 ν 及极点 μ, 那么通过 Cayley 变换

$$\boldsymbol{T}_C=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\boldsymbol{A}-\nu\boldsymbol{B})$$

可以将之转化为 SEP:

$$\boldsymbol{T}_C\,\boldsymbol{x}=\tau\boldsymbol{x}$$

其中, $\tau=(\lambda-\mu)^{-1}(\lambda-\nu)$.

证明: 由 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 可知 $(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{Bx}-\mu\boldsymbol{Bx}=(\lambda-\mu)\boldsymbol{Bx}$, 因为 μ 不是特征值,

所以 $\lambda \neq \mu$ 且 $\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B}$ 可逆，从而 $(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=(\lambda-\mu)^{-1}\boldsymbol{x}$. 同时，由于

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\lambda-\nu)\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}&=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}-\nu\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\nu\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})\\&=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\boldsymbol{A}-\nu\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

从而可得 $(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\lambda-\nu)\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=(\lambda-\mu)^{-1}(\lambda-\nu)\boldsymbol{x}$，此即 $\boldsymbol{T}_C\boldsymbol{x}=\tau\boldsymbol{x}$. 证毕.

显然，$\boldsymbol{T}_C=(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B}+\mu\boldsymbol{B}-\nu\boldsymbol{B})=\boldsymbol{I}+(\mu-\nu)(\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}+(\mu-\nu)\boldsymbol{T}_{SI}$，因此 Cayley 变换法实质上仍然是位移求逆法.

例 7.2.2　求解广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}5&1\\1&1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}18&2\\2&2\end{pmatrix}$$

解法一：直接计算法.

$|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}|=\begin{vmatrix}5-18\lambda&1-2\lambda\\1-2\lambda&1-2\lambda\end{vmatrix}=(1-2\lambda)(4-16\lambda)$，因此广义特征值为 $\lambda_1=\dfrac{1}{2}$，$\lambda_2=\dfrac{1}{4}$. 再分别解齐次线性方程组 $(\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 和 $(\boldsymbol{A}-\lambda_2\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，可得对应的广义特征向量分别为

$$\boldsymbol{x}_1=k_1(0,1)^{\mathrm{T}}\quad(k_1\neq 0),\quad \boldsymbol{x}_2=k_2(1,-1)^{\mathrm{T}}\quad(k_2\neq 0)$$

解法二：直接求逆法.

$\boldsymbol{T}_I=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}=\dfrac{1}{4}\begin{pmatrix}1&0\\1&2\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{T}_I$ 的特征值为 $\lambda_1=\dfrac{1}{2}$，$\lambda_2=\dfrac{1}{4}$，此即所求广义特征值. 再分别解齐次线性方程组 $(\lambda_1\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}_I)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 和 $(\lambda_2\boldsymbol{I}-\boldsymbol{T}_I)\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，可得对应的广义特征向量分别为

$$\boldsymbol{x}_1=k_1(0,1)^{\mathrm{T}}\quad(k_1\neq 0),\quad \boldsymbol{x}_2=k_2(1,-1)^{\mathrm{T}}\quad(k_2\neq 0)$$

解法三：Cholesky 分解法.

$\boldsymbol{B}$ 的 Cholesky 分解为 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$，其中 $\boldsymbol{L}=\dfrac{1}{3}\begin{pmatrix}9\sqrt{2}&0\\\sqrt{2}&4\end{pmatrix}$，因此 $\breve{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}=\dfrac{1}{35}\begin{pmatrix}10&2\sqrt{2}\\2\sqrt{2}&17\end{pmatrix}$，$\breve{\boldsymbol{A}}$ 的特征值为 $\lambda_1=\dfrac{1}{2}$，$\lambda_2=\dfrac{1}{4}$，此即所求广义特征值. 分别解齐次线性方程组 $(\lambda_1\boldsymbol{I}-\breve{\boldsymbol{A}})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 和 $(\lambda_2\boldsymbol{I}-\breve{\boldsymbol{A}})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，可得全体非零解分别为

$$\breve{\boldsymbol{x}}_1=l_1(1,2\sqrt{2})^{\mathrm{T}}\quad(l_1\neq 0),\quad \breve{\boldsymbol{x}}_2=l_2(2\sqrt{2},-1)^{\mathrm{T}}\quad(l_2\neq 0)$$

因此 λ_1,λ_2 所对应的广义特征向量分别为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_1&=\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}\breve{\boldsymbol{x}}^1=\frac{l_1}{12}(0,18\sqrt{2})^{\mathrm{T}}=k_1(0,1)^{\mathrm{T}}\quad(k_1\neq 0)\\\boldsymbol{x}_2&=\boldsymbol{L}^{-\mathrm{H}}\breve{\boldsymbol{x}}^2=\frac{l_2}{12}(9,-9)^{\mathrm{T}}=k_2(1,-1)^{\mathrm{T}}\quad(k_2\neq 0)\end{aligned}$$

Matlab 中的内置函数 eig 也可用于计算广义特征值,其调用格式为

```
[V,D] = eig(A,B)
```

返回的矩阵 $\boldsymbol{V}$ 和对角阵 $\boldsymbol{D}$ 满足 $\boldsymbol{AV}=\boldsymbol{BVD}$,因此 $\boldsymbol{D}$ 的对角元是广义特征值,$\boldsymbol{V}$ 的列向量是相应的广义特征向量.

当 $\boldsymbol{A}$ 是对称矩阵且 $\boldsymbol{B}$ 是对称正定矩阵时,可使用调用格式

```
[V,D]= eig(A,B,'chol')
```

其效果与前面的调用格式等价. 显然,这种调用格式采用的是 Cholesky 分解法.

另外还有一种调用格式

```
[V,D]= eig(A,B,'qz')
```

采用的是 QZ 算法,详见 7.4.3 小节.

对于广义特征值的计算,Matlab 中还提供了更加灵活的内置函数 eigs,其调用格式为

eigs(A,B),eigs(A,B,k)或 eigs(A,B,k,sigma)

其中,k 表示返回的广义特征值的数目,而 sigma 的取值则比较复杂:

(1)当 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 都是对称矩阵时,LM 或 SM 分别表示返回的是模最大的广义特征值或模最小的广义特征值,值 LA 或 SA 分别表示返回的是最大的广义特征值或最小的广义特征值,BE 则表示同时返回最大的广义特征值和最小的广义特征值.

(2)当 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 不是对称矩阵或 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是复矩阵时,LR 或 SR 分别表示返回的是实部最大的广义特征值或实部最小的广义特征值,LI 或 SI 分别表示返回的是虚部最大的广义特征值或虚部最小的广义特征值.

(3)当 sigma 是实数或纯虚数时,返回的是最靠近 sigma 的广义特征值.

7.2.2 二次特征值问题

QEP 作为最简单的 NEP,如今正受到越来越多的关注,因为它广泛应用在结构动力分析、振动声学、多输入多输出系统分析、电路仿真、信号处理、流体力学、有限元分析、约束最小二乘问题等各个领域. 例如,对无外力作用但具有粘滞阻尼的结构系统,其运动方程为二阶微分方程

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}. \tag{7.2.7}$$

其中,$\boldsymbol{M}$ 表示质量矩阵(mass matrix),满足 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{M}>0$; $\boldsymbol{C}$ 表示粘性阻尼矩阵(viscous damping matrix),满足 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{C}$; $\boldsymbol{K}$ 表示刚度矩阵(stiffness matrix),满足 $\boldsymbol{K}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{K}>0$; 向量 $\ddot{\boldsymbol{x}},\dot{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{x}$ 分别表示加速度、速度和位移. 将通解 $\boldsymbol{x}=\mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{u}$ 代入方程 (7.2.7), 即得特征方程

$$(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}$$

这显然就是一个二次特征值问题.

抽去上述问题的物理意义,并放宽对矩阵 $\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 的要求,就得到了数学上的二次特

征值问题，即确定标量 $\lambda \in \mathbb{C}$ 和非零向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$，使得

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0},\ \ \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}(\lambda) = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \tag{7.2.8}$$

其中，$\boldsymbol{Q}(\lambda) = \lambda^2\boldsymbol{M} + \lambda\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}$，$\lambda$ 为特征值；$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 分别为λ 对应的右特征向量和左特征向量.

对所有的 λ 值，如果 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda) \equiv 0$ 时，则称 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 是**正则的**，否则就是非正则的. 显然 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的特征多项式是 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda) = \det(\boldsymbol{M})\lambda^{2n}$ + 低次项，所以当 $\boldsymbol{M}$ 非奇异时，$\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 是正则的，并且有 $2n$ 个有限特征值. 但当 $\boldsymbol{M}$ 奇异时 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的次数 $r < 2n$，此时 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 只有 r 个有限特征值，同时存在 $2n-r$ 个无穷特征值. 无穷特征值实际上对应的是逆多项式 $\lambda^2\boldsymbol{Q}(\lambda^{-1}) = \lambda^2\boldsymbol{K} + \lambda\boldsymbol{C} + \boldsymbol{M}$ 的零特征值. 另外对正则的 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 而言，相异特征值可能对应同一个特征向量. QEP 与 SEP 和 GEP 的一个主要代数区别在于：QEP 有 $2n$ 个特征值（有限或无穷大），最多 $2n$ 个右特征向量及最多 $2n$ 个左特征向量. 这就意味着，如果有 n 个以上的特征向量，它们显然构成了一个线性相关集.

例 7.2.3 求解二次特征值问题 $\boldsymbol{Q}(\lambda)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，其中

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} 1 & -6 & 0 \\ 2 & -7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{K} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

解：显然 $\boldsymbol{Q}(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda+1 & 6\lambda^2-6\lambda & 0 \\ 2\lambda & 6\lambda^2-7\lambda+1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^2+1 \end{pmatrix}$，而且 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 是正则的，因为

$$\det\boldsymbol{Q}(\lambda) = -6\lambda^5 + 11\lambda^4 - 12\lambda^3 + 12\lambda^2 - 6\lambda + 1 \equiv 0$$

解特征方程 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda) = 0$，得 5 个有限特征值为

$$\lambda_1 = \frac{1}{3},\ \lambda_2 = \frac{1}{2},\ \lambda_3 = 1,\ \lambda_4 = i,\ \lambda_5 = -i$$

接着依次解齐次方程组 $\boldsymbol{Q}(\lambda_k)x = 0\ (k = 1,2,\cdots,5)$，可得相应的特征向量分别为

$$\boldsymbol{x}_1 = (1,1,0)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x}_2 = (1,1,0)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x}_3 = (0,1,0)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x}_4 = (0,0,1)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x}_5 = (0,0,1)^{\mathrm{T}}$$

显然，第 6 个特征值 $\lambda_6 = \infty$，此时解齐次方程组 $(0^2\boldsymbol{K} + 0\boldsymbol{C} + \boldsymbol{M})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，即得 $\boldsymbol{x}_6 = (1,0,0)^{\mathrm{T}}$.

可以看出，尽管 $\lambda_1 \neq \lambda_2$，可是却有 $\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_2$. 另外，$\lambda_4,\lambda_5$ 对应的特征向量也相同. 这样剩下 4 个不同的特征向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4,\boldsymbol{x}_6$，它们的一个极大无关组为 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_3,\boldsymbol{x}_4$，其中的向量个数正好是 $n=3$. 事实上，可以证明，如果正则的 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 有 $2n$ 个两两不等的特征值，那么它必有 n 个线性无关的特征向量组，正好可以构成 $\mathbb{C}^n$ 的一组基. 这显然是对 SEP 和 GEP 中的相关结论所做的重要推广.

Matlab 中没有专门为 QEP 提供内置函数，但其中用于求解 PEP 的内置函数 polyeig 当然可用来求解 QEP，其调用格式为

```
[X,E]= polyeig(K,C,M),
```

其中,向量 `E` 的元素为特征值. 另外,请注意参数的顺序.

关于 polyeig 函数,特别要注意的还有以下几点:

(1)`polyeig(A)`等价于 `eig(A)`;

(2)`polyeig(A,B)`等价于 `eig(A,-B)`;

(3)对标量 $a_0,\cdots,a_p$ 而言,`polyeig(a0,..,ap)`等价于 `roots([ap .. a0])`,即求特征多项式 $a_p\lambda^p+\cdots+a_1\lambda+a_0=0$ 的特征根.

对于稠密矩阵的 SEP 和 GEP,求解数值解的标准方法是将涉及的矩阵约化至能显露出特征值的某种较简单的形式,例如,单个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 标准型和矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义 Schur 标准型. 遗憾的是,这些标准型不能推广到 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 这样的次数大于 1 的 λ 矩阵.

对于稠密矩阵,QEP 的数值方法可分成两类: 一类是通过分解 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$, 将 QEP 转化为一次特征值问题(1 个 SEP 和 1 个 GEP);另一类则是通过线性化技术,将 QEP 转化为与之等价的 GEP. 至于大型稀疏矩阵的 QEP,主流的仍然是投影类方法,本书略去不谈.

1. 分解法

令 $\boldsymbol{Q}(S)=\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}^2+\boldsymbol{C}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{K}$, $\boldsymbol{S}\in\mathbb{C}^{n\times n}$, 则有

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)-\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{S})=(\lambda\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{C})(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}) \tag{7.2.9}$$

这就是二次矩阵多项式的**广义 Bezout 定理**. 显然,当 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{S})=\boldsymbol{O}$, 即二次矩阵方程

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{S})=\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}^2+\boldsymbol{C}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{K}=\boldsymbol{O}$$

存在(右)解(solvent) $\boldsymbol{S}$ 时,式 (7.2.9) 就特殊为

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)=(\lambda\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{C})(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})$$

此时 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda)=0$ 即为 $\det(\lambda\boldsymbol{M}+\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{C})\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})=0$, 因此原 QEP 分解为如下问题:

(1)求 SEP$\boldsymbol{S}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$ 的 n 个特征对;

(2)求矩阵束 $(\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{C},-\boldsymbol{M})$ 的 GEP,即 $(\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}+\boldsymbol{C})\boldsymbol{x}=-\lambda\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}$ 的 n 个特征对.

分解法存在两个困难. 首先,解 $\boldsymbol{S}$ 可能不存在,即使解存在,它们的条件数实际中也不容易检验;其次,解 $\boldsymbol{S}$ 的计算也是件麻烦事,可能比求解该 QEP 更困难.

2. 线性化方法

对于微分方程 (7.2.7) 的解 $\boldsymbol{x}=\mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{u}$, 易知 $\dot{\boldsymbol{x}}=\lambda\mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{x}$. 因此若令

$$\boldsymbol{z}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{x}\\ \lambda\boldsymbol{x}\end{pmatrix},\boldsymbol{w}=\begin{pmatrix}(\lambda\boldsymbol{M}+\boldsymbol{C})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{y}\end{pmatrix} \tag{7.2.10}$$

以及

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\\ -\boldsymbol{K} & -\boldsymbol{C}\end{pmatrix},\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{M}\end{pmatrix} \tag{7.2.11}$$

则 (7.2.8) 中的 QEP 被替换为如下的等价系统:

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}=\lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{z},\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\lambda\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$$

我们称此 GEP 是原 QEP (7.2.8) 的一个**线性化**(linearization).

注意到矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 具有如下分解:

$$A-\lambda B=\begin{pmatrix} O & I \\ -I & -\lambda M-C \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda^2 M+\lambda C+K & O \\ O & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & O \\ -\lambda I & I \end{pmatrix}$$

因此，根据 λ 矩阵的知识，我们知道

$$A-\lambda B \sim \begin{pmatrix} \lambda^2 M+\lambda C+K & O \\ O & I \end{pmatrix}$$

并且 $\det(A-\lambda B)=\det(\lambda^2 M+\lambda C+K)$. 这意味着式 (7.2.8) 中的 GEP 的特征值就是原 QEP 的特征值，同时利用式 (7.2.10) 就可得到原 QEP 的特征向量.

上述线性化的缺点是矩阵 A,B 未必保持矩阵 M,C,K 的特殊性，例如当 M,C,K 都是 Hermite 矩阵时，矩阵 A 未必也是 Hermite 矩阵. 好在这可以通过对 A,B 的修改来弥补. 因为线性化不是唯一的，所以我们可选择能保留 $Q(\lambda)$ 的对称性和其他结构特性的线性化.

事实上，实践中经常使用的是**第一友型**：

$L1$：
$$A=\begin{pmatrix} O & N \\ -K & -C \end{pmatrix}, B=\begin{pmatrix} N & O \\ O & M \end{pmatrix}$$

或**第二友型**：

$L2$：
$$A=\begin{pmatrix} -K & O \\ O & N \end{pmatrix}, B=\begin{pmatrix} C & M \\ N & O \end{pmatrix}$$

其中，N 可取任意的 n 阶可逆矩阵. 选择第一友型还是第二友型，显然取决于 M 和 K 的奇异性. 一般将 N 选为单位矩阵或者单位矩阵的倍数，例如 $\|M\|I$ 或 $\|K\|I$. 显然，$N=I$ 的情形就是式 (7.2.11). 而当 M,C,K 都是 Hermite 矩阵时，若 K 还是可逆矩阵，则可取 $N=K$，此时得到的矩阵 A,B 都是 Hermite 矩阵.

谱变换法在 GEP 中发挥了重要作用，类似地，通过对 QEP 实施谱变换，也可以增强线性化方法的适用范围. 下面对之做些简单介绍.

(1) **直接求逆法**. 如果希望计算某些从模来看值最小的特征值及其特征向量，当 0 不是 QEP 的特征值，也就是矩阵 K 可逆时，显然可考虑倒代换 $\mu=\lambda^{-1}$，此时 QEP (7.2.8) 变形为 QEP

$$(M+\mu C+\mu^2 K)x=0$$

采用线性化技术之后，可得如下 GEP：

$$Az=\frac{1}{\lambda}Bz \tag{7.2.12}$$

其中

$$A=\begin{pmatrix} -C & -M \\ I & O \end{pmatrix}, B=\begin{pmatrix} K & O \\ O & I \end{pmatrix}, z=\begin{pmatrix} x \\ \lambda x \end{pmatrix} \tag{7.2.13}$$

此时矩阵束 $(\boldsymbol{B},\boldsymbol{A})$ 具有如下分解：

$$\boldsymbol{B}-\lambda\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & \lambda\boldsymbol{M}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O}\\ -\lambda\boldsymbol{I} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}$$

此即

$$\boldsymbol{B}-\lambda\boldsymbol{A}\sim\begin{bmatrix}\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}$$

因此 GEP (7.2.12) 的特征值就是原 QEP 的特征值，同时利用式 (7.2.13) 可得相应的特征向量.

直接求逆法的好处是位于原 QEP 的谱集内部的特征值可被变换到新 QEP 的谱集的两端.

(2)**位移求逆法**. 如果希望计算指定值 σ 附近的某些特征值，可先通过位移 $\tau=\lambda-\sigma$ 将之转化为求 0 附近的特征值，再结合直接求逆法 $\mu=\tau^{-1}$ 将它们变换到 μ 的谱集的两端. 此时 QEP (7.2.8) 变形为

$$(\mu^2\boldsymbol{M}'+\mu\boldsymbol{C}'+\boldsymbol{K}')\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \tag{7.2.14}$$

其中，$\mu=(\lambda-\sigma)^{-1}$，$\boldsymbol{M}'=\sigma^2\boldsymbol{M}+\sigma\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}$，$\boldsymbol{C}'=\boldsymbol{C}+2\sigma\boldsymbol{M}$，$\boldsymbol{K}'=\boldsymbol{M}$. 同样采用线性化技术之后，可得如下 GEP：

$$\begin{bmatrix}-\boldsymbol{C}' & -\boldsymbol{K}'\\ \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ (\lambda-\sigma)\boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\frac{1}{\lambda-\sigma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{M}' & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ (\lambda-\sigma)\boldsymbol{x}\end{bmatrix}$$

进而可求得原 QEP 的特征值 $\lambda=\sigma+\mu^{-1}$ 及相应的特征向量 $\boldsymbol{x}$.

(3)**Cayley 变换法**. 通过 Cayley 变换

$$\mu=\frac{\alpha\lambda-\beta}{\lambda-\tau}$$

其中，任意常数 α,β,τ 满足 $\alpha\tau-\beta\neq 1$，这样原 QEP (7.2.8) 就变成了

$$(\mu^2\boldsymbol{M}'+\mu\boldsymbol{C}'+\boldsymbol{K}')\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \tag{7.2.15}$$

其中，$\boldsymbol{M}'=\tau^2\boldsymbol{M}+\tau\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}$，$\boldsymbol{C}'=-2\tau\beta\boldsymbol{M}-(\alpha\tau+\beta)\boldsymbol{C}-2\sigma\boldsymbol{K}$，$\boldsymbol{K}'=\beta^2\boldsymbol{M}+\alpha\beta\boldsymbol{C}+\alpha^2\boldsymbol{K}$. 同样，原 QEP (7.2.8) 中靠近反位移(antishift) τ 的特征值 λ 被变换到 QEP (7.2.15) 中特征值 μ 的谱集的两端，同样，接近位移 β/α 的特征值 λ 被变换到 QEP (7.2.14) 中接近于 0 的特征值 μ.

7.3 Rayleigh 商和广义 Rayleigh 商

瑞利勋爵在 1870 年代研究振动系统的小振荡时，为了找到合适的广义坐标，提出一种特殊形式的商，被后人称为 Rayleigh 商. 在物理、信息等学科的理论研究中，经常需要确定 Hermite 矩阵的 Rayleigh 商的极值，以及两个 Hermite 矩阵的广义 Rayleigh 商的极值.

7.3.1 Rayleigh 商

对二次型 $x^{\mathrm{H}}Ax$，如果存在 $Ax=\lambda x$，那么显然有 $\lambda=\dfrac{x^{\mathrm{H}}Ax}{x^{\mathrm{H}}x}$. 相应地，如果 $Ax\approx\lambda x$，我们自然也希望成立 $\lambda\approx\dfrac{x^{\mathrm{H}}Ax}{x^{\mathrm{H}}x}$.

定义 7.3.1　设 A 是 Hermite 矩阵，称 $R(x)=\dfrac{x^{\mathrm{H}}Ax}{x^{\mathrm{H}}x}$ $(x\neq 0)$ 为矩阵 A 的 Rayleigh 商(quotient).

显然，$R(x)$ 是向量 x 的标量函数. 我们自然希望确定此函数的取值范围或极性. 注意到

$$R(x)=\frac{x^{\mathrm{H}}Ax}{\|x\|_2^2}=\left(\frac{x}{\|x\|_2}\right)^{\mathrm{H}}A\left(\frac{x}{\|x\|_2}\right)=R\left(\frac{x}{\|x\|_2}\right)$$

因此，我们可以把对 $R(x)$ 的极性的讨论限定在单位球面 $S=\{x\in\mathbb{C}^n\mid\|x\|_2=1\}$ 上.

因为单位球面 S 是闭集，又因为 $R(x)$ 是 x 的连续函数，因此根据多元函数的最值定理，$R(x)$ 在 S 上存在最大值和最小值. 由于特征值与 Rayleigh 商的关系，我们自然会问：这些最值与矩阵 A 的特征值之间有什么关系？

事实上，Rayleigh 商是 Hermite 特征值问题的“最佳逼近”，即对任意 $r\in\mathbb{C}$，有

$$\|Ax-R(x)x\|_2\leqslant\|Ax-rx\|_2$$

这是因为由 $Ax-rx=(Ax-R(x)x)+(R(x)-r)x$ 以及 $x^{\mathrm{H}}(Ax-R(x)x)=0$，可知

$$\|Ax-rx\|_2^2=\|Ax-R(x)x\|_2^2+\|(R(x)-r)x\|_2^2\geqslant\|Ax-R(x)x\|_2^2$$

因为 A 是 Hermite 矩阵，故 A 有谱分解 $A=U\Lambda U^{\mathrm{H}}$，这里 U 是酉矩阵，则

$$R(x)=x^{\mathrm{H}}Ax=x^{\mathrm{H}}U\Lambda U^{\mathrm{H}}x=(U^{\mathrm{H}}x)^{\mathrm{H}}\Lambda(U^{\mathrm{H}}x)$$

令 $\Lambda=\mathrm{diag}(\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$，并假定 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$，同时令 $U^{\mathrm{H}}x=y=(y_1,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}$，则有

$$\|y\|_2=\|U^{\mathrm{H}}x\|_2=\|x\|_2=1,R(x)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2$$

所以

$$\lambda_1=\lambda_1\sum_{i=1}^{n}|y_i|^2\leqslant R(x)\leqslant\lambda_n\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2=\lambda_n$$

定理 7.3.1　**(Rayleigh-Ritz)** 设 A 是 Hermite 矩阵，其特征值为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$，则

$$\lambda_1=\min_{x\neq 0}R(x)=\min_{x^{\mathrm{H}}x=1}x^{\mathrm{H}}Ax,\quad\lambda_n=\max_{x\neq 0}R(x)=\max_{x^{\mathrm{H}}x=1}x^{\mathrm{H}}Ax\tag{7.3.1}$$

Rayleigh-Ritz 定理意味着 $R(x)\geqslant\lambda_1$，因此不断地改进 x 的取值，可以用 $R(x)$ 从右侧逼近 A 的最小特征值 λ_1. 类似地，$R(x)\leqslant\lambda_n$，因此不断地改进 x 的取值，也可以用 $R(x)$ 从左侧逼近 A 的最大特征值 λ_n. 至于如何改进 x 的取值，以使得 $R(x)$ 取到这些极值，这自然让人联想到共轭梯度法. 有兴趣的读者请查阅相关文献.

另外，Rayleigh-Ritz 定理中的条件"$\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵"必不可少. 例如对矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2\\0&1\end{pmatrix}$，定理的结论就不成立.

Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的其余特征值是否也有类似结论呢? 我们先来考虑特征值 λ_2 和 λ_{n-1}.

设 $\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)$，显然，我们要考虑那些与 $\boldsymbol{u}_1$ 正交的向量 $\boldsymbol{x}$，即 $\boldsymbol{x}\in\mathrm{span}(\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3,\cdots,\boldsymbol{u}_n)\equiv V_2$. 由于 $y_1=\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=0$，因此前面的证明可修改为

$$R(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2=\sum_{i=2}^{n}\lambda_i|y_i|^2\geqslant\lambda_2\sum_{i=2}^{n}|y_i|^2=\lambda_2$$

类似地，考虑那些与 $\boldsymbol{u}_n$ 正交的向量 $\boldsymbol{x}$，即 $\boldsymbol{x}\in\mathrm{span}(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{n-1})=V_n^{\perp}$. 由于 $y_n={\boldsymbol{u}_n}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=0$，因此前面的证明可修改为

$$R(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2=\sum_{i=1}^{n-1}\lambda_i|y_i|^2\leqslant\lambda_{n-1}\sum_{i=1}^{n-1}|y_i|^2=\lambda_{n-1}$$

推广上述证明，一般地，我们有：

定理 7.3.2　设 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵，其特征值为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$，相应的标准正交特征向量为 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$. 令 $V_i=\mathrm{span}(\boldsymbol{u}_i,\boldsymbol{u}_{i+1},\cdots,\boldsymbol{u}_n)$，$V_{n+1}=\{\boldsymbol{0}\}$，则

$$\lambda_i=\min_{\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in V_i}R(\boldsymbol{x})=\min_{\substack{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1\\ \boldsymbol{x}\in V_i}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\quad \lambda_i=\max_{\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in V_{i+1}^{\perp}}R(\boldsymbol{x})=\max_{\substack{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1\\ \boldsymbol{x}\in V_{i+1}^{\perp}}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\tag{7.3.2}$$

遗憾的是，定理 7.3.2 中的公式实用价值不大. 因为它们将 λ_i 的计算限定在求 Rayleigh 商在 V_i 的局部极值上，为此必须先求出 V_i，这在数值上是比较困难的. 因此必须对其加以改进.

由于 V_i 实际上是 $\mathbb{C}^n$ 的一个 $n-i+1$ 维子空间，因此我们希望将搜索极值的空间放大到任意 $n-i+1$ 维子空间 W_i. 显然，增大后的集合的极大值不会比原集合的小，极小值也不会比原集合大.

设有 $\boldsymbol{w}\in\mathbb{C}^n$，仍然考虑那些与 $\boldsymbol{w}$ 正交的向量 $\boldsymbol{x}$，即 $\boldsymbol{x}\in\mathrm{span}(\boldsymbol{w})^{\perp}\equiv W_2$ 且 $\|\boldsymbol{x}\|_2=1$，则

$$\begin{aligned}\max_{\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{w}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}&=\max_{\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{w}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\\&=\max_{\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})\quad(\text{令}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\equiv\boldsymbol{y}=(y_1,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}})\\&=\max_{\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{w}}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2=\max_{\boldsymbol{y}\perp\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2(\text{因为}\|\boldsymbol{y}\|_2=\|\boldsymbol{x}\|_2=1)\\&\geqslant\max_{\substack{\boldsymbol{y}\perp\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}\\ y_1=\cdots=y_{n-2}=0}}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2=\max_{\substack{\boldsymbol{y}\perp\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}\\ y_1=\cdots=y_{n-2}=0}}\sum_{i=n-1}^{n}\lambda_i|y_i|^2\geqslant\lambda_{n-1}\end{aligned}$$

并且，当 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}_n$ 时等号成立. 因此 $\min\limits_{\boldsymbol{w}\in\mathbb{C}^n}(\max\limits_{\boldsymbol{x}\in W_2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})=\lambda_{n-1}$.

一般地，我们有：

定理 7.3.3　(**Courant-Fischer**)设 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵，其特征值为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant$

λ_n，则

$$\lambda_i = \max_{\dim(W_i)=n-i+1} \min_{\substack{x^H x=1 \\ x\in W_i\subset\mathbb{C}^n}} R(x),\ \lambda_i = \min_{\dim(W_{n-i+1})=i} \max_{\substack{x^H x=1 \\ x\in W_{n-i+1}\subset\mathbb{C}^n}} R(x) \tag{7.3.3}$$

Courant-Fischer 定理又被称为 Hermite 矩阵特征值的极值定理. 根据此定理,可以证明下面的交错定理.

定理 7.3.4 (Sturm 交错定理)设 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵，$\boldsymbol{A}$ 的 r 阶主子矩阵 $\boldsymbol{A}_r$ 和 $r+1$ 阶主子矩阵 $\boldsymbol{A}_{r+1}$ 的特征值分别为 $\tau_1 \leqslant \tau_2 \leqslant \cdots \leqslant \tau_r$ 和 $\mu_1 \leqslant \mu_2 \leqslant \cdots \leqslant \mu_{r+1}$ 则

$$\mu_1 \leqslant \tau_1 \leqslant \mu_2 \leqslant \tau_2 \leqslant \cdots \leqslant \mu_r \leqslant \tau_r \leqslant \mu_{r+1}$$

例 7.3.1　考虑 pascal 矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 6 & 10 \\ 1 & 4 & 10 & 20 \end{pmatrix}$$

显然，$\sigma(\boldsymbol{A}_1)=\{1\}$，$\sigma(\boldsymbol{A}_2)=\{0.3820,2.6180\}$，$\sigma(\boldsymbol{A}_3)=\{0.1270,1.0000,7.8730\}$，$\sigma(\boldsymbol{A}_4)=\{0.0380,0.4538,2.2034,26.3047\}$. 不难发现它们都满足 Sturm 交错定理.

7.3.2　广义 Rayleigh 商

定义 7.3.2　设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 都是 Hermite 矩阵且 $\boldsymbol{B} > 0$，则称

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \quad (\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}) \tag{7.3.4}$$

为矩阵束 $\boldsymbol{A}$ 相对于矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的广义 **Rayleigh 商**，简称正定矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义 Rayleigh 商.

由于 $\boldsymbol{B} > 0$，因此存在平方分解 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{H}^2$，这里 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{B}^{1/2} > 0$. 令 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{y}$，则

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{y}^H\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^H\boldsymbol{H}^2\boldsymbol{x}} \equiv \frac{\boldsymbol{y}^H\breve{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^H\boldsymbol{y}} \tag{7.3.5}$$

即广义 Rayleigh 商等价于 Hermite 矩阵 $\breve{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}^{-1}$ 的 Rayleigh 商. 因此讨论广义 Rayleigh 商的极性时,只需在椭球面

$$S_{\boldsymbol{B}} = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \mid (\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})_{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{x}^H\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} = 1\}$$

上讨论,注意内积现在是 $\boldsymbol{B}$ 内积.

由式 (7.3.5) 和 Rayleigh-Ritz 定理可知,当选出的 $\boldsymbol{y}$ 分别是 $\breve{\boldsymbol{A}}$ 的最小特征值和最大特征值所对应的特征向量时,广义 Rayleigh 商分别达到最小值和最大值. 若设 $(\lambda,\boldsymbol{y})$ 为 $\breve{\boldsymbol{A}}$ 的特征对，即 $\breve{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{y}$，则 $\boldsymbol{H}^{-1}\breve{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{H}^{-2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{y}$. 注意到 $\boldsymbol{B}^{-1} = \boldsymbol{H}^{-2}$，因此 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$，此即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$. 这说明广义 Rayleigh 商达到的是广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} =$

$\lambda \boldsymbol{Bx}$ 的最值.

事实上,按照极值理论,易知广义 Rayleigh 商 $R(\boldsymbol{x})$ 的驻点 $\boldsymbol{x}_0$ 就是广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda \boldsymbol{Bx}$ 的特征向量,$R(\boldsymbol{x}_0)$ 就是相应的特征值. 这是因为式 (7.3.4) 可改写为 $(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx})R(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}$,两边求梯度,即得 $\nabla_{x}R(\boldsymbol{x})=\frac{2}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}}(\boldsymbol{Ax}-R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{Bx})$,因此 $\nabla_{x}R(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ 当且仅当 $\boldsymbol{Ax}_0=R(\boldsymbol{x}_0)\boldsymbol{Bx}_0$.

综合上述,即得推广的 Rayleigh-Ritz 定理.

定理 7.3.5 (**Rayleigh-Ritz**)设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵且 $\boldsymbol{B}>0$. 并设广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的特征值为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$,则

$$\lambda_1=\min_{x\neq 0}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}},\quad \lambda_n=\max_{x\neq 0}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bx}} \tag{7.3.6}$$

类似地,我们有:

定理 7.3.6 设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵且 $\boldsymbol{B}>0$,并设广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的特征值为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$,则

$$\lambda_i=\max_{\dim(W_i)=n-i+1}\ \min_{\substack{x^{\mathrm{H}}Bx=1\\ x\in W_i\subset\mathbb{C}^n}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax},\quad \lambda_i=\min_{\dim(W_{n-i+1})=i}\ \max_{\substack{x^{\mathrm{H}}Bx=1\\ x\in W_{n-i+1}\subset\mathbb{C}^n}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}$$

定理 7.3.6 又称为广义特征值的极值定理.

7.3.3　乐在其中的瑞利勋爵

瑞利勋爵(见图 7－5)原名约翰·威廉·斯特拉特(John William Strutt),尊称瑞利男爵三世(Third Baron Rayleigh). 1861 年,他考入剑桥三一学院. 在导师劳斯(Edward Routh,1831－1907,以现代控制理论中的劳斯判据等闻名于世)的精心辅导下,他于 1865 年获得数学荣誉学位,并列最优等(Senior Wrangler). 当时剑桥的主试人指出:"瑞利的毕业论文极好,不用修改就可以直接付印."在大学期间,瑞利还深受斯托克斯(George Gabriel Stokes,1819－1903,以曲线积分中的斯托克斯公式而遐迩闻名)的影响. 因为当时的学生没有亲自动手进行实验的机会,而斯托克斯则在课程讲授中将理论阐述与物理实验相结合,这给瑞利提供了耳濡目染科学实验的机会,也极大地影响了瑞利的科学研究之路. 瑞利本人后来也提到了斯托克斯对他走上科学研究之路的重要影响.



图 7－5　瑞利勋爵(1842－1919)

1871 年,瑞利发表光的散射理论,第一次正确地解释了"天空为什么是蓝色的". 同年,他娶了大学同学贝尔福伯爵(Arthur James Balfour,1848－1930,英国保守党核心人物,1902－1905 年间担任英国首相)的妹妹. 婚后不久,他染上了严重的风湿热,差点丢了性命. 大病初愈后,他接受医生的建议,携妻赴埃及旅游. 这次旅行不仅恢复了

他的健康,而且还催生了他的名著《声学理论》. 出版于 1877 年的该书第一卷论述了振动发声媒质的力学,次年出版的第二卷则论述了声波的传播. Rayleigh 商就出现在此书之中.

1879 年,麦克斯韦去世,瑞利应邀担任空缺的剑桥大学卡文迪许实验室主任,直至 1884 年主动辞职. 他对这份工作投入了全部身心,也对剑桥的物理教学做出了意义深远的改革. 担任实验室主任期间,他多方筹集资金,为实验室添置了大批的新仪器,因为他觉得实验室应该是教学和研究的中心. 后来,该实验室培养了多位诺贝尔奖得主. 除了他自己获 1904 年诺贝尔物理学奖外,接替他的汤姆逊(Joseph John Thomson,1856—1940),因在这里发现了电子,获 1906 年的诺贝尔物理学奖. 还有汤姆逊的学生卢瑟福(Ernest Rutherford,1871—1937),也是在这里,利用 α 射线发现了原子的“行星式”有核结构,第一次打开了原子的大门,并于 1908 年获诺贝尔化学奖. 瑞利要求学生都要通过实验来学习和研究物理,为此他开发了热学、电磁学、物质的性质、光学和声学等方面的实验课程. 由他开创的这种培养学生的方法从此在欧美的大学流传开来.

瑞利被授予诺贝尔物理学奖,是为了表彰他于 1895 年发现了惰性气体氩这一重要成就. 之所以授予他物理学奖,是因为当年的化学奖授予了拉姆塞(William Ramsay,1852—1916),他与瑞利共同发现了氩,进而于 1898 年发现了惰性气体族中其他的成员氪、氖、氙. 同年的两项诺贝尔奖颁给同一项伟大的发现,可见发现惰性气体元素的重要意义.

提起惰性气体的发现,我们不能不提到汤姆逊的话:“大部分学者认为科学的想象力更胜于精确的量度. 其实,瑞利和拉姆塞的工作证明:一切科学上的伟大发现,几乎完全来自精确的量度和从大量伪数字中明察秋毫.”事实上,1882 年,瑞利就曾经测过氢和氧的密度. 经过十年长期的测定,他宣布氢和氧的原子量之比实际上不是 1∶16,而是 1∶15.882. 他还测定了氮的密度,发现从液态空气中分馏出来的氮,跟从亚硝酸铵中分离出来的氮,密度有微小的但却是不可忽略的偏差,前者的密度为 1.2572 g/cm^3,而后者的密度却为 1.2505 g/cm^3. 尽管两者的数值仅相差千分之几,但他认为,这一差异远远超出了实验误差范围,一定有尚未查清的因素在起作用. 为此,他先后提出过几种假说来解释造成这种不一致的原因. 两年后,瑞利在英国皇家学会宣读了他的实验报告,只有拉姆赛表示有兴趣和他合作. 拉姆赛重复了瑞利的实验,宣布证实了瑞利的结果. 两位科学家在经过严密的研究后,于当年确定了第一个惰性气体,取名为氩,其希腊文的原意是“不活泼”、“懒惰”的意思.

惰性气体氩的发现,应该说是瑞利严谨的科学态度、广博的科学知识和精深的科学研究的必然结果. 有人统计了瑞利的出版物,居然达到 446 项之巨,涉及物理和应用数学的许多方面,其中物理方面有声学、波的理论、彩色视觉、电动力学、电磁学、光的散射、液体的流动、流体动力学、气体的密度、粘滞性、毛细作用、弹性和照相术,等等. 他于 1879 年发表的行波理论如今已发展为孤立子理论. 因此,他被视为 19 世纪末年达到经典物理学巅峰的少数学者之一.

瑞利的家族里之前没有人对科学表露出丝毫兴趣,优渥的生活也使得他完全不必靠科学研究谋生. 纵观他的一生,我们可清晰地追寻到斯托克斯对他的深刻影响. 这种影响使得他愿意购买仪器设备,并在自己的庄园里组建实验室,以开展科学实验. 这种影响也

使得他改革了剑桥的物理教学.或许也正是这种影响,使得他不顾许多同事的婉言相劝,毅然辞去了卡文迪许实验室主任一职,转而集中精力从事科学研究.所有这些行为背后的动因,或许用他自己的话更能说明清楚.他曾把自己的论文整理为五卷本的论文集.在论文集的开头,他写下了这样的言词:

伟大精深啊,
上帝造物之奇妙!
研究探索吧,
求得世界的奥秘,
乐在其中矣!

7.4 特征值问题的数值算法综述

由于存在大量应用,随着计算能力的提高,特征值的数值计算尤其是大型计算如今已引起越来越多的关注.特征值的算法也与高性能计算(HPC)存在密切的关系.

在求解特征值问题时,需要考虑的因素远远多于求解线性方程组,因为不同的因素极大地决定了算法的不同选择.仅就标准特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 而言,就需要考虑下列因素:

(1) $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵还是复矩阵?

(2) $\boldsymbol{A}$ 是否具有某些特殊性质,例如 $\boldsymbol{A}$ 是实对称矩阵、Hermite 矩阵或酉矩阵吗?

(3) $\boldsymbol{A}$ 是否具有某种特殊结构,例如 $\boldsymbol{A}$ 是带状矩阵、稀疏矩阵或 Toeplitz 矩阵吗?

(4) 需要求 $\boldsymbol{A}$ 的哪些特征值,比如最大的特征值、绝对值最小的特征值还是特征值的实部?

尽管如此,一般仍可将特征值问题大致划分为求解中小型稠密矩阵全部特征值的变换类方法和求解大型稀疏矩阵部分特征值的投影类方法,前者以 QR 算法为代表,后者则以 Krylov 子空间类方法为标志.

7.4.1 扰动和敏感性

我们在 7.1.1 小节已经指出,矩阵的特征值是连续地依赖于矩阵元素的,但这种依赖关系对扰动的敏感程度却千差万别.以矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1\\0&2\end{pmatrix}$ 为例,显然 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1=\lambda_2=2$. 如果在 (1,2) 位置有一处扰动 $\varepsilon>0$, 即扰动矩阵为 $\boldsymbol{E}=\begin{pmatrix}0&\varepsilon\\0&0\end{pmatrix}$, 显然 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E}$ 的特征值仍为 $\mu_1=\mu_2=2$, 即特征值不受影响;如果在 (1,1) 或 (2,2) 位置有一处扰动 $\varepsilon>0$, 则 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E}$ 的特征值为 $\mu_1=2+\varepsilon,\mu_2=2$ 或 $\mu_1=2,\mu_2=2+\varepsilon$, 即特征值的扰动幅度与元素相同;如果在 (2,1) 位置有一处扰动 $\varepsilon>0$, 则 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E}$ 的特征值为 $\mu_1=2+\sqrt{\varepsilon},\mu_2=2-\sqrt{\varepsilon}$, 不仅重特征值变成了相异特征值,使得特征子空间由 1 维变成了 2 维,即特征值问题的结构发生了变化,而且特征值的扰动幅度也比元素大得多(例如元素的扰动为 $\varepsilon=10^{-20}$ 时,特征值的扰动上升到 $\sqrt{\varepsilon}=10^{-10}$, 两者相差 10^{10} 倍之巨). 如果矩阵有多处扰动,

由此产生的复杂情况可想而知.

注意到上面的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是亏损矩阵,这说明非亏损矩阵的情况应该要简单一些. 事实上,对非亏损矩阵,存在下面的扰动定理.

定理 7.4.1 (**Bauer-Fike**)设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$,其中 $\boldsymbol{A}$ 是非亏损矩阵,即存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$,使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P\Lambda P}^{-1}$,则对任意 $\mu\in\sigma(\boldsymbol{B})$,必存在 $\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})$,使得

$$\min_{\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})}|\lambda-\mu|\leqslant\|\boldsymbol{P}\|_v\|\boldsymbol{P}^{-1}\|_v\|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\|_v \tag{7.4.1}$$

其中,$v=1,2,\infty$.

证明: $\mu\in\sigma(\boldsymbol{A})$ 时结论显然成立. 设 $\mu\notin\sigma(\boldsymbol{A})$,则 $\mu I-\boldsymbol{A}$ 是可逆矩阵. 设 $\boldsymbol{x}$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 对应 μ 的特征向量,则有 $(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}$,由于 $\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{P}^{-1}$,因此可得

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{P}^{-1}(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}$$

两边取范数 v($v=1,2,\infty$),利用 $\|\boldsymbol{x}\|_v>0$ 及矩阵范数的相容性,可得

$$1\leqslant\|(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\|_v\|\boldsymbol{P}\|_v\|\boldsymbol{P}^{-1}\|_v\|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\|_v$$

注意到 $(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}$ 是对角矩阵,其范数 $\|(\mu\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\|_v=\max\limits_{\lambda\in\sigma(\boldsymbol{A})}|\lambda-\mu|^{-1}$,因此定理成立. 证毕.

由 Bauer-Fike 定理可知,$\kappa_v(\boldsymbol{P})=\|\boldsymbol{P}\|_v\|\boldsymbol{P}^{-1}\|_v$ 是特征值扰动估计中的放大系数. 考虑到矩阵 $\boldsymbol{P}$ 不是唯一的,因此取 $\kappa_v(\boldsymbol{P})$ 的下确界即 $\inf\kappa_v(\boldsymbol{P})$ 为特征值问题的条件数,记为 $\kappa_v(\boldsymbol{A})$ 或 $\kappa(\boldsymbol{A})$. 显然,对于正规矩阵 $\boldsymbol{A}$ 而言,$\boldsymbol{P}$ 是酉矩阵,而且 $\kappa_2(\boldsymbol{A})=1$,因此正规矩阵(包括实对称矩阵和 Hermite 矩阵)总是良态的.

要特别注意的是,关于特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$ 的条件数 $\kappa(\boldsymbol{A})=\inf\|\boldsymbol{P}\|_v\|\boldsymbol{P}^{-1}\|_v$,与关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 求逆和关于求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的条件数 $\kappa(\boldsymbol{A})=\|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{A}^{-1}\|$ 是完全不同的两个概念,虽然它们的计算公式类似. 例如对矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}10^{-10}&0\\0&1\end{pmatrix}$,两者的 $\kappa_2(\boldsymbol{A})$ 分别是 1 和 10^{10},可见一个是良态的,而另一个则严重病态.

如前所述,对亏损矩阵即非正规矩阵的扰动,情况非常复杂,其中既可能有对扰动很敏感的特征值,也可能有对扰动不敏感的特征值. 因此,我们有必要考虑单个特征值的扰动理论.

设 $(\lambda,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 为矩阵的特征三元组,且 $\|\boldsymbol{x}\|_2=\|\boldsymbol{y}\|_2=1$. 再设 $\boldsymbol{A}$ 有扰动 $\varepsilon\boldsymbol{E}$,其中,$\|\boldsymbol{E}\|_2=1$,且 $\boldsymbol{A}+\varepsilon\boldsymbol{E}$ 的特征对为 $(\lambda(\varepsilon),\boldsymbol{x}(\varepsilon))$. 显然,$\lambda(0)=\lambda,\boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}$. 对等式

$$(\boldsymbol{A}+\varepsilon\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}(\varepsilon)=\lambda(\varepsilon)\boldsymbol{x}(\varepsilon)$$

两边关于 ε 求导,并令 $\varepsilon=0$,可得到 $\boldsymbol{A}\dot{\boldsymbol{x}}(0)+\boldsymbol{Ex}=\dot{\lambda}(0)x+\lambda\dot{\boldsymbol{x}}(0)$,用 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}$ 左乘两边,并注意到 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}$,则有 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ex}=\dot{\lambda}(0)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$,从而

$$|\dot{\lambda}(0)|=\left|\frac{\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ex}}{\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right|\leqslant\frac{1}{|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}|}=\frac{1}{\cos\theta}$$

其中 θ 为 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 之间的夹角. 当取 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}}$ 时,等号成立. 显然 $\boldsymbol{s}(\lambda)=|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}|$ 的倒数反映了扰动的上界,因此我们称之为单特征值 λ 的条件数.

以上分析表明，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有量级为 ε 的扰动时，其特征值 λ 的扰动可能会达到 $\varepsilon/s(\lambda)$，因此 $s(\lambda)$ 很小时，我们就有理由相信 λ 是病态的. 注意到 $s(\lambda)$ 是 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的夹角余弦 $\cos\theta$，因此当 λ 是单特征值时 $s(\lambda)$ 是唯一的. 另外，当 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 接近于正交时，λ 非常敏感；而当 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 接近于平行时，λ 几乎不敏感. 事实上，我们知道，对实对称矩阵和 Hermite 矩阵，有 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，$\cos\theta=1$，因此相应的 λ 是良态的，这与前面的分析也是吻合的.

Matlab 早期的 eig 函数和 eigs 函数都没有计算单特征值的条件数，利用后来增加的 polyeig，可以计算这些条件数. 对于标准特征值问题，其调用格式为

```
[X, e, s] = polyeig(A,I)
```

其中，向量 s 中就保存了各个特征值的条件数.

7.4.2　幂法与反幂法

幂法反映了计算矩阵特征值最古典、最简单的思想. 它充分利用了矩阵向量积的优点，特别是对于稀疏矩阵，有很高的计算效率.

设 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，且存在可逆矩阵 $\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$ 和对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{X\Lambda X}^{-1}$，即 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化矩阵. 又设

$$|\lambda_1|>|\lambda_2|\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n| \tag{7.4.2}$$

其中，按模最大的特征值 λ_1 称为**主特征值**(principal eigenvalue)，相应的 $\boldsymbol{x}_1$ 称为**主特征向量**(principal eigenvector). 显然，λ_1 是非零的单特征值.

对任意初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，幂法的迭代格式就是

$$\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k-1)}\quad(k=1,2,\cdots) \tag{7.4.3}$$

由于存在线性组合 $\boldsymbol{x}^{(0)}=\sum\limits_{i=1}^{n}\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{x}_i$，则

$$\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k-1)}=\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}^{(0)}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}_i=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\alpha}_i\lambda_i^k\boldsymbol{x}_i=\lambda_1^k\Big[\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{x}_1+\sum_{i=2}^{n}(\lambda_i\mid\lambda_1)^k\boldsymbol{\alpha}_i\boldsymbol{x}_i\Big]$$

显然，由于 $|\lambda_i/\lambda_1|<1$，故有 $\boldsymbol{x}^*=\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\lambda_1^k\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{x}_1$，即 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 最终会趋向于主特征向量 $\boldsymbol{x}_1$，这样 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 可作为 $\boldsymbol{x}_1$ 的近似值.

我们又该如何求 λ_1 的近似值呢？若记 $m_k=\|\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty$，则当 $k\gg1$ 时显然有

$$m_k\approx|\lambda_1^k|\cdot\|\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{x}_1\|_\infty$$

从而 $|\lambda_1|=\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{m_{k+1}}{m_k}$，即 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 前后两次迭代的 ∞范数的比值，就趋向于 $\boldsymbol{A}$ 的主特征值的模 $|\lambda_1|$.

当然，联想到对于给定的近似特征向量 $\boldsymbol{x}^{(k)}$，Rayleigh 商 $R(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 是对应的最佳近似特征值，因此更简单的办法应该是用 $R(\boldsymbol{x}^{(k)})$ 来求 λ_1 的近似值.

为防止溢出，幂法的实现中一般还采用规范化技术.

至此，我们可将幂法的迭代格式 (7.4.3) 更改为

$$m_k = \|\boldsymbol{x}^{(k)}\|_2,\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)} \mid m_k,\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}^{(k)},\lambda_k = (\boldsymbol{y}^{(k)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(k+1)} \quad (k = 0,1,2,\cdots) \tag{7.4.4}$$

类似地,欲求按模最小的特征值及其特征向量,只要借助于谱变换技术中的倒变换将之转化为幂法即可. 这就是反幂法的思想.

仍设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是可对角化矩阵,其特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$. 又设

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n| > 0 \tag{7.4.5}$$

其中,按模最小的特征值 λ_n 是非零的单特征值. 则 $\boldsymbol{A}$ 可逆且 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征值满足

$$|\lambda_n^{-1}| > |\lambda_{n-1}^{-1}| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_1^{-1}| \tag{7.4.6}$$

即 λ_n^{-1} 为 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的主特征值, $\boldsymbol{x}_n$ 是相应的主特征向量. 显然反幂法等价于对 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 使用幂法. 此时相应的迭代格式即为

$$\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{U}^{-1}(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{x}^{(k-1)}),\ m_k = \|\boldsymbol{y}^{(k)}\|_\infty,\ \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{y}^{(k)}/m_k \quad (k = 1,2,\cdots) \tag{7.4.7}$$

其中,要求迭代开始前对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 做 LU 分解,并在每次迭代中通过分别求解三角形方程组 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}^{(k-1)}$ 和 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{z}$ 来确定 $\boldsymbol{y}^{(k)}$.

7.4.3 QR 算法

QR 算法是 20 世纪十大算法之一,是计算中小型稠密矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 全部特征对最常用和最有效的方法. 实际上,Matlab 的内置函数 eig 就是基于 QR 算法来实现的.

最基本的 QR 算法基于的就是如下的 QR 迭代:

(1)令 $\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{A}$.

(2)对 $k = 1,2,\cdots$ 重复下列步骤,直至收敛:

① 对 $\boldsymbol{A}_k$ 做 QR 分解: $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k$;

② 将分解得到的 $\boldsymbol{Q}_k$ 和 $\boldsymbol{R}_k$ 颠倒相乘,得到 $\boldsymbol{A}_{k+1}$, 即令 $\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k$.

显然,在上述基本 QR 算法中, $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k$, 此即 $\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{R}_k$, 因此

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{k+1} &= \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_{k-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{k-1}\boldsymbol{Q}_{k-1}\boldsymbol{Q}_k \\ &= \cdots = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_{k-1}^{\mathrm{H}}\cdots\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{k-1}\boldsymbol{Q}_k \equiv \breve{\boldsymbol{Q}}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\breve{\boldsymbol{Q}}_k\end{aligned}$$

其中, $\breve{\boldsymbol{Q}}_k = \boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{k-1}\boldsymbol{Q}_k$, 因此迭代序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 保持 $\boldsymbol{A}$ 的特征值不变.

同时,由于 $\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{Q}_{k+1}\boldsymbol{R}_{k+1}$, $\breve{\boldsymbol{Q}}_{k+1} = \breve{\boldsymbol{Q}}_k\boldsymbol{Q}_{k+1}$, 因此

$$\boldsymbol{A}\breve{\boldsymbol{Q}}_k = \breve{\boldsymbol{Q}}_k\boldsymbol{A}_{k+1} = \breve{\boldsymbol{Q}}_k\boldsymbol{Q}_{k+1}\boldsymbol{R}_{k+1} = \breve{\boldsymbol{Q}}_{k+1}\boldsymbol{R}_{k+1}$$

令 $\breve{\boldsymbol{R}}_k = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{R}_{k-1}\cdots\boldsymbol{R}_1$, 则 $\breve{\boldsymbol{R}}_{k+1} = \boldsymbol{R}_{k+1}\breve{\boldsymbol{R}}_k$, 从而

$$\breve{\boldsymbol{Q}}_{k+1}\breve{\boldsymbol{R}}_{k+1} = \boldsymbol{A}\breve{\boldsymbol{Q}}_k\breve{\boldsymbol{R}}_k = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}\breve{\boldsymbol{Q}}_{k-1}\breve{\boldsymbol{R}}_{k-1}) = \cdots = \boldsymbol{A}^k\cdot\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1 = \boldsymbol{A}^{k+1}$$

即 $\boldsymbol{A}^k = \breve{\boldsymbol{Q}}_k\breve{\boldsymbol{R}}_k$, 其中 $\breve{\boldsymbol{Q}}_k$ 仍然是酉矩阵, $\breve{\boldsymbol{R}}_k$ 仍然是上三角矩阵,这说明 QR 迭代实际上也是对 $\boldsymbol{A}^k$ 作 QR 分解.

可以证明，上述基本 QR 算法满足如下的基本收敛定理：

定理 7.4.2　设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的特征值按模是互不相同的，即

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0 \tag{7.4.8}$$

并且存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$，使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P\Lambda P}^{-1}$. 设矩阵 $\boldsymbol{P}^{-1}$ 具有 LU 分解 $\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{LU}$，则上述基本 QR 算法产生的矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ **基本收敛**到上三角矩阵 $\boldsymbol{T}$，且 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 对角元的极限为

$$\lim_{k\to\infty} a_{ii}^{(k)} = \lambda_i \quad (i = 1,2,\cdots,n)$$

这里，$\boldsymbol{A}_k = (a_{ii}^{(k)})_{n\times n}$.

定理 7.4.2 中的**基本收敛**指的是矩阵序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 的对角元均收敛，且 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 的严格下三角部分的元素都收敛到零. 至于 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 的严格上三角部分的元素是否收敛，这里就不必关心了，因为对求 $\boldsymbol{A}$ 的特征值而言，基本收敛已经足够了.

定理 7.4.2 也说明，QR 迭代也可以看成是对 $\boldsymbol{A}$ 作 Schur 分解. 特别地，如果 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermite 矩阵，那么上三角矩阵 $\boldsymbol{T}$ 就变成了对角矩阵. 也正是由于 QR 算法的成功，人们才开始重视起 Schur 分解，使得在数值计算中 Schur 分解最终取代 Jordan 分解，成为了大家最偏爱的矩阵标准型.

当 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 时，由于 QR 算法的计算量较大，出于节约计算成本的缘故，在数值实现时一般先通过正交相似将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变换成上 Hessenberg 矩阵 $\boldsymbol{H}$，然后再对 $\boldsymbol{H}$ 使用 QR 迭代将之化成上三角矩阵 $\boldsymbol{T}$. 特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 是实对称矩阵时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 先被变换成三对角矩阵，然后再使用 QR 迭代化成了对角矩阵.

类似地，我们也可以采用位移技术来提高算法的收敛速度. 当 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 时，设 $s_k \in \mathbb{R}$ 是特征值的近似值，则**带一步位移**的基本 QR 算法为：

(1)令 $\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{A}$;

(2)对 $k = 1,2,\cdots$ 重复下列步骤，直至收敛：

① 对 $\boldsymbol{A}_k - s_k\boldsymbol{I}$ 做 QR 分解，即 $\boldsymbol{A}_k - s_k\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k$;

② 将 $\boldsymbol{Q}_k$ 和 $\boldsymbol{R}_k$ **颠倒相乘**后，再加回位移，即令 $\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k + s_k\boldsymbol{I}$.

由于 $\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k + s_k\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k + s_k\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}_k - s_k\boldsymbol{I})\boldsymbol{Q}_k + s_k\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{Q}_k$，因此上述算法得到的迭代序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 仍然是两两正交相似的，即迭代序列 $\{\boldsymbol{A}_k\}$ 保持 $\boldsymbol{A}$ 的特征值不变.

作为 QR 分解的应用，下面我们介绍 QZ 算法.

例 7.4.1　(**基于广义 Schur 分解的 QZ 算法**) 对于广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{Bx}$，我们的目标是寻找可逆矩阵 $\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Z}$，使得

$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{AZ},\ \boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{BZ}$$

均为标准型，这里矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 与 $(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{B}_1)$ 是等价的. 注意等价矩阵束的特征对之间存在关系：

$$\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{Bx} \Leftrightarrow \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{y},\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{Zy}$$

与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型类似，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 也存在 Weierstrass 标准型及 Krone-

cher 标准型,但前面已指出 Jordan 标准型在数值计算上不敌 Schur 分解,类似地,对矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$, 从数值观点看,更吸引人的是 Moler 和 Stewart 于 1973 年提出的**广义 Schur 分解**,即对矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{n\times n}$, 存在酉矩阵 $\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Z}$, 使得

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z},\quad \boldsymbol{S}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}$$

都是上三角矩阵.

我们知道,在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}^{H}\boldsymbol{T}\boldsymbol{U}$ 中,上三角 $\boldsymbol{T}$ 的对角元就是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值. 与之类似,在广义 Schur 分解中,当 $\boldsymbol{S}$ 的对角元 $s_{ii}\neq 0$ 时,有 $\lambda_i=t_{ii}/s_{ii}$, 其中 t_{ii} 为 $\boldsymbol{T}$ 的对角元.

问题是当 $s_{ii}=0,t_{ii}\neq 0$ 以及 $s_{ii}=t_{ii}=0$ 时,前者出现无穷特征值,即 $\lambda_i=\infty$, 后者的特征值则可取任意复数,即此时特征值的谱 $\lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})=\mathbb{C}$.

求解广义特征值 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的 QZ 算法分三步:

(1) Hessenberg-Triangular 约化,即通过酉变换先将 $\boldsymbol{A}$ 化为上 Hessenberg 矩阵 $\boldsymbol{H}$, 将 $\boldsymbol{B}$ 化为上三角阵 $\boldsymbol{S}_1$;

(2) QZ 迭代,即对 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}$ 使用带一步位移的基本 QR 算法,将 $\boldsymbol{H}$ 化为上三角阵或准上三角阵 $\boldsymbol{T}$, 同时将 $\boldsymbol{S}_1$ 化成上三角阵 $\boldsymbol{S}$, 这是本算法的核心部分;

(3) 计算 $\boldsymbol{T},\boldsymbol{S}$ 的特征对,并据此求出原 GEP 的特征对.

Matlab 提供了内置函数 qz,可用于计算矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的 QZ 分解,并且 Matlab 的内置函数 eig 就是基于 QZ 算法来求解广义特征值问题的.

7.4.4 Krylov 子空间法

同上一章一样,本节仅考虑实矩阵. 实际上,对复矩阵也有类似的 Krylov 子空间法.

对于大型矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值问题,同解线性方程组的情形一样,目前主流的方法仍然是 Krylov 子空间法,其中,根据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否对称,又可细分为 Arnoldi 法和 Lanczos 法. 上一章已经指出,当初正是克雷洛夫建议用幂法所形成的矩阵序列 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{x},\cdots$ 来确定特征多项式的系数,所以 Krylov 子空间法可谓是幂法的自然推广.

对标准特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{x}$, 其中 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n},\lambda\in\mathbb{C},\boldsymbol{x}\neq 0$, 我们仍然可以使用 Galerkin 原理. 设 $\mathcal{K}_k=\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k)$ 和 $\mathcal{L}_k=\mathrm{span}(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_k)$ 都为 k 维子空间,它们的标准正交基构成矩阵

$$\boldsymbol{V}_k=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k),\quad \boldsymbol{W}_k=(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_k)$$

若在 $\mathcal{K}_k$ 中已算得 $\boldsymbol{A}$ 的近似特征向量 $\boldsymbol{x}^{(k)}$, 即 $\boldsymbol{Ax}^{(k)}\approx\lambda_k\boldsymbol{x}^{(k)}$ (否则已得到精确解 $\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{x}^{(k)}$), 则存在 $\boldsymbol{y}^{(k)}\neq 0$, 使得 $\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}$. 记 $\boldsymbol{r}^{(k)}=\boldsymbol{AV}_k\boldsymbol{y}^{(k)}-\lambda\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}$, 并仍取 Galerkin 条件 $\boldsymbol{r}^{(k)}\perp\mathcal{L}_k$, 可得

$$(\boldsymbol{W}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k)\,\boldsymbol{y}^{(k)}=\lambda_k\boldsymbol{y}^{(k)},\quad \boldsymbol{y}^{(k)}\neq\boldsymbol{0}\tag{7.4.9}$$

因此一旦算出小型特征值问题 (7.4.9) 的特征对 $(\lambda_k,\boldsymbol{y}^{(k)})$, 就有可能算出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的近似特征对值 $(\lambda_k,\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)})$.

如果仍然选取 $\mathcal{L}_k=\mathcal{K}_k$, 并用 Arnoldi 过程构造 $\mathcal{K}_k$ 的正交基 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_k$, 则同样可得 $\boldsymbol{A}$ 的 Hessenberg 分解

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{H}_k + \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}} \tag{7.4.10}$$

其中，$\boldsymbol{H}_k$ 为上 Hessenberg 矩阵，$\boldsymbol{u}_k = h_{k+1,k}\,v_{k+1}$，以及

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{H}_k \tag{7.4.11}$$

并且当 $(\theta_k, \boldsymbol{y}^{(k)})$ 为 $\boldsymbol{H}_k$ 的特征对时，有

$$(\boldsymbol{A}-\theta_k\boldsymbol{I})\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)} = h_{k+1,k}\,\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(k)}\boldsymbol{v}_{k+1},\ \|(\boldsymbol{A}-\theta_k\boldsymbol{I})\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}\|_2 = h_{k+1,k}\,|\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(k)}|$$

其中，θ_k 被称为 Ritz 值，$\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}$ 被称为 Ritz 向量. 显然，当 $h_{k+1,k} = 0$ 时有 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} = \theta_k\boldsymbol{x}^{(k)}$，即 Ritz 值 θ_k 和 Ritz 向量 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 分别为原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最佳近似特征值 λ_k 和相应的特征向量. 这就是 **Arnoldi 算法**的思想.

在 Arnoldi 算法中，如何计算上 Hessenberg 矩阵 $\boldsymbol{H}_k$ 的特征对 $(\theta_k, \boldsymbol{y}^{(k)})$ 呢？考虑到 $k \ll n$，因此 k 阶矩阵 $\boldsymbol{H}_k$ 显然是中小型矩阵，其特征对的计算可使用 QR 算法.

至此，我们可给出如下 Arnoldi 算法：

(1)任取初始向量 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，满足 $\|\boldsymbol{x}^{(0)}\|_2 = 1$；

(2)对 $k = 1,2,\cdots$ 重复下列步骤，直至余量范数 $h_{k+1,k}\,|\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}^{(k)}|$ 小于某个阈值：

① 使用 CGS 算法或 MGS 算法完成 k 步 Arnoldi 过程，得到上 Hessenberg 矩阵 $\boldsymbol{H}_k$；

② 使用 QR 算法或其他方法求出 $\boldsymbol{H}_k$ 的特征对 $(\theta_k, \boldsymbol{y}^{(k)})$；

③ 计算 $\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{y}^{(k)}$，并置 $\lambda_k = \theta_k$，从而得到 $\boldsymbol{A}$ 的近似特征对 $(\lambda_k, \boldsymbol{x}^{(k)})$.

Arnoldi 算法是求解大型稀疏矩阵极端(最大和最小)特征值很有效的方法，其收敛速度比幂法快得多，而且可选用比 n 小得多的 $k \ll n$，因此所需的存储量也相当有限.

当我们将 Arnoldi 算法应用到实对称矩阵时，就得到了 Lanczos 算法，因此 Lanczos 算法可视为 Arnoldi 算法的特殊情形，尽管在历史上两者是各自独立发展出来的.

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{SR}^{n\times n}, \lambda \in \mathbb{C}, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，并用与 Arnoldi 过程类似的过程构造 $\boldsymbol{\mathcal{K}}_k$ 的正交基 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k$，则类似可得 $\boldsymbol{A}$ 的三对角分解

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{T}_k + \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{e}_k^{\mathrm{T}} \tag{7.4.12}$$

其中，$\boldsymbol{T}_k$ 为对称的三对角矩阵，记为 $\boldsymbol{T}_k = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{u}_k = \beta_k\boldsymbol{v}_{k+1}$，以及

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k = \boldsymbol{T}_k \tag{7.4.13}$$

显然，由式 (7.4.12) 可知

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \beta_{i-1}\boldsymbol{v}_{i-1} + \alpha_i\boldsymbol{v}_i + \beta_i\boldsymbol{v}_{i+1} \quad (i = 1,2,\cdots,k) \tag{7.4.14}$$

其中，约定 $\beta_0\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{0}$. 根据各 $\boldsymbol{v}_i$ 的相互正交性，用 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ 左乘式 (7.4.14) 两端，可得

$$\alpha_i = v_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i \quad (i = 1,2,\cdots,k) \tag{7.4.15}$$

记 $\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i - \beta_{i-1}\boldsymbol{v}_{i-1} - \alpha_i\boldsymbol{v}_i$，则 $\boldsymbol{r}_i = \beta_i\boldsymbol{v}_{i+1}$ (假定 $\beta_i \neq 0$ 即 $\boldsymbol{r}_i \neq \boldsymbol{0}$，否则产生中断)，且

$$\|r_i\|_2 = \beta_i,\quad v_{i+1} = \frac{1}{\beta_i} r_i \quad (i = 1,2,\cdots,k) \tag{7.4.16}$$

至此,我们就得到了如下的 **Lanczos 过程**,其中的 v_i 称为 **Lanczos 向量**.

Lanczos 过程:对给定的实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$:

(1)选择初始向量 v_1, 满足 $\|v_1\|_2 = 1$. 置 $\beta_0 = 0$, $v_0 = \mathbf{0}$.

(2)对 $i = 1,2,\cdots,k$, 执行下列迭代:

① 令 $r_i = Av_i - \beta_{i-1} v_{i-1}$, 计算 $\alpha_i = (v_i, r_i)$, 然后更新 r_i 为 $r_i - \alpha_i v_i$;

② 置 $\beta_i = \|r_i\|_2$, 如果 $\beta_i = 0$ 则停止迭代,否则置 $v_{i+1} = r_i/\beta_i$.

如果 Lanczos 过程在某一步产生中断,即 $\beta_i = \|r_i\|_2 = 0$. 注意到此时式(7.4.12)中的 $u_i = r_i$, 因此我们得到

$$AV_i = V_i T_i \tag{7.4.17}$$

其中, T_i 是一个 i 阶对称三对角矩阵. 若能计算出 T_i 的特征对 $(\theta_i, y^{(i)})$, 则有 $AV_i y^{(i)} = \theta_i V_i y^{(i)}$, 因此 Ritz 值 θ_i 和 Ritz 向量 $x^{(i)} = V_i y^{(i)}$ 分别为原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最佳近似特征值 λ_i 和相应的特征向量. 这就是 **Lanczos 算法**的思想.

同样地, Lanczos 算法的误差具有下列性质:

$$(A - \theta_i I) V_i y^{(i)} = \beta_i e_i^{\mathrm{T}} y^{(i)} \ v_{i+1} \|(A - \theta_i I) V_i y^{(i)}\|_2 = \beta_i |e_i^{\mathrm{T}} y^{(i)}| = \beta_i |y_i^{(i)}|$$

其中, $(\theta_i, y^{(i)})$ 为 T_i 的特征对, $y_i^{(i)}$ 是 $y^{(i)}$ 的最后一个分量.

至此,我们可给出如下 Lanczos 算法:

(1)任取初始向量 $x^{(0)}$, 满足 $\|x^{(0)}\|_2 = 1$;

(2)利用 Lanczos 过程产生对称三对角矩阵 T_k, 假设没有中断;

(3)使用对称 QR 算法或其他方法求出 T_k 的特征值即 Ritz 值 $\theta_1 \geqslant \theta_2 \geqslant \cdots \geqslant \theta_k$, 如果需要也可只计算极端特征值 θ_1 和 θ_k;

(4)适当增加 k 到 k', 求得 T_k' 的 Ritz 值 $\theta_1' \geqslant \theta_2' \geqslant \cdots \geqslant \theta_k'$. 比较 θ_1 和 θ_1', 以及 θ_k 和 θ_k', 如果两者相差不大,就作为 λ_1 和 λ_k 的近似值,否则重复步骤(4).

在没有舍入误差的情况之下,至多 n 步, Lanczos 算法必然终止,因为此时它得到的正交向量组 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 已张满整个 $\mathbb{R}^n$. 但由于舍入误差的影响,计算得到的 Lanczos 向量很快失去正交性,对此,人们开发了各种重正交(reorthogonalization)技巧,有兴趣的读者请查阅相关文献.

7.4.5 Jacobi-Davidson 法

最近十几年来, Jacobi-Davidson 法已逐渐成为特征值计算的主流方法. 该方法基于两个基本原则. 第一个原则仍然是使用 Galerkin 原理来扩张子空间 $\mathcal{K}_k$, 但在构造其正交基 $v_1, v_2, \cdots, v_k$ 时不再选用 Krylov 子空间,这个想法源自 E. R. Davidson 于 1975 年提出的 Davidson 法;第二个原则是采用校正技巧,得到相应的方程,近似求解此方程后,就得到了扩张的新方向.

为了强调 Jacobi-Davidson 法具有普适性,本节我们将矩阵放宽为复矩阵.

设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\mathcal{K}_k = \mathrm{span}(v_1, v_2, \cdots, v_k)$, $V_k = (v_1, v_2, \cdots, v_k)$, 使用 Galerkin 条件

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{s} - \theta\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{s} \perp \mathcal{K}_k \tag{7.4.18}$$

可得

$$\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_k\boldsymbol{s} = \theta\boldsymbol{s} \tag{7.4.19}$$

显然,计算出标准特征值问题 (7.4.19) 的 k 个特征对 $(\theta_i, \boldsymbol{s}_i)$ 后,即可得 $\boldsymbol{A}$ 的 k 个 Ritz 对 $(\theta_i, \boldsymbol{V}_k\boldsymbol{s}_i)$,它们仍然是 $\boldsymbol{A}$ 的近似特征对.

Jacobi-Davidson 法的精彩之处在于第二个原则. 这个想法可追溯到雅可比于 1846 所做的工作. 假定 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$, 且 $\boldsymbol{u}_i$ 是已知的特征值 λ 的特征向量 $\boldsymbol{x}$ 的近似值,雅可比建议(他当时针对的是强对角占优矩阵)采用 $\boldsymbol{u}_i$ 的正交校正 $\boldsymbol{t}$, 即有

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{t}) = \lambda(\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{t}),\ \ \boldsymbol{t} \perp \boldsymbol{u}_i \tag{7.4.20}$$

由于 $\boldsymbol{t} \perp \boldsymbol{u}_i$, 故可将子空间限定在 $\boldsymbol{u}_i^{\perp}$, 即与 $\boldsymbol{u}_i$ 正交的子空间上. 此时算子 $\boldsymbol{A}$ 在 $u_i^{\perp}$ 上的正交投影为 $\boldsymbol{A}$ 在 $\boldsymbol{u}_i^{\perp}$ 上的限制

$$\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})$$

注意到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \theta_i\boldsymbol{u}_i$, 即 $\theta_i = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i$, 因此

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} - \theta_i\,\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$$

将上式代入式 (7.4.20), 并注意到 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}_i - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i) = \boldsymbol{0}$ 及 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{t} = 0$, 则有

$$(\boldsymbol{B} - \lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{t} = -\boldsymbol{r}_i + (\lambda - \theta_i - \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{t})\,\boldsymbol{u}_i \tag{7.4.21}$$

其中, $\boldsymbol{r}_i = (\boldsymbol{A} - \theta_i\boldsymbol{I})\,\boldsymbol{u}_i$. 由于 $\boldsymbol{t} \perp \boldsymbol{u}_i$ 且 $\boldsymbol{r}_i \perp \boldsymbol{u}_i$, 因此式 (7.4.21) 中右端第二项应该为零向量,即 $\boldsymbol{t}$ 满足方程

$$(\boldsymbol{B} - \lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{t} = -\boldsymbol{r}_i = -(\boldsymbol{A} - \theta_i I)\,\boldsymbol{u}_i \tag{7.4.22}$$

也就是方程

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})\boldsymbol{t} = -\boldsymbol{r}_i \tag{7.4.23}$$

由于实际中 λ 是待求的未知量,因此最明显的想法就是用近似值 θ_i 来代替式 (7.4.23) 中的 λ, 这就导出了 **Jacobi-Davidson 校正方程**(correction equation):

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{A} - \theta_i\boldsymbol{I})(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}})\boldsymbol{t} = -\boldsymbol{r}_i \tag{7.4.24}$$

对已知的 θ_i, 近似求解校正方程 (7.4.24), 得到的 $\boldsymbol{t}_i$ 可用于扩张子空间 $\mathcal{K}_k$. 这就是 **Jacobi-Davidson 法**的基本思想.

7.4.6 兰乔斯先生,请您压阵

兰乔斯(Cornelius Lanczos,1893—1974,见图 7-6)出生于匈牙利的犹太家庭,父亲是一名律师. 1911 年考入布达佩斯大学后,物理老师厄特弗什·罗兰(Baron Roland von Eötvös,1848—1919,世界著名物理学家,为纪念他,布达佩斯大学 1950 年起改名为罗兰大学)首先让他迷上了相对论,数学老师费耶尔(Lipót Fejér,1880—1959,引入了表示傅

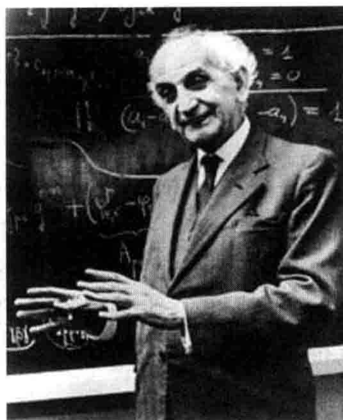


图 7-6　兰乔斯(1893—1974)

立叶级数部分和平均值的费耶尔和)接着让他学会了傅立叶级数、正交多项式和插值. 另外,费耶尔的讲课风格也对兰乔斯影响很大. 1921 年,兰乔斯获得博士学位,其博士论文研究的是麦克斯韦方程与泛函理论的关系. 他赠给爱因斯坦一本,爱因斯坦读后称赞论文"说理充分且具有新颖的思想",并在 1928—1929 年聘他为助手. 后来他回忆说,与爱因斯坦合作的这段时间是他一生中最快乐的岁月. 不幸的是,当时德国的社会环境使得他被迫流亡美国.

1942 年,兰乔斯与人合作发表了计算傅立叶系数的一种矩阵方法,可是这种方法直到 23 年后才被库勒(James William Cooley)和图基(John Tukey, 1915—2000)重新发现,那就是快速傅立叶变换(FFT)算法. 这种情况对他而言已经不是第一次了. 早在 1924 年,他就发现了爱因斯坦场方程的一个精确解,其中的重力场是由尘埃粒子绕具有圆柱对称性的轴转动而生成的,它作为广义相对论最简单的精确解之一,尤其能够用于证明闭合类时曲线的存在性. 可是直到 1937 年,这个精确解才被施托库姆(Willem Jacob van Stockum, 1910—1944)重新发现,并被命名为"Stockum 尘埃".

1944—1946 年期间,兰乔斯辞去普渡大学的教职,转而在波音公司从事飞机设计工作. 新工作的性质,加上他使用计算器而不是滑尺的独特计算风格,使得他开发出许多解决问题的新方法. 1949 年,他加入 INA,从而深入地研究了线性方程组和特征值问题的数值解法. 在这期间,他提出了 Lanczos 算法和用于计算 gamma 函数值的 Lanczos 逼近,并对 CG 方法也做出了贡献.

1950 年代美国的麦卡锡主义使得兰乔斯被迫再度流亡. 应薛定谔的邀请,1952 年,他远赴都柏林高等研究院(DIAS). 在那里,他又一次恢复了对广义相对论的浓厚兴趣,并发表和出版了自己一生的大部分文章和书籍,包括《线性微分算子》、《古往今来的空间》等重要著作,以及确定 Weyl 张量的 Lanczos 势能和图像处理中的 Lanczos 滤波,等等.

他的前妻病逝于 1939 年"二战"开始之前,当时他侥幸带走了当时 5 岁的儿子. 因为在 1944 年纳粹清洗匈牙利犹太人期间,只有他的叔叔和一个侄子幸免于难. 后来,当他定居于西雅图的儿子写信报告长孙出世的消息时,他回信说,这个孩子的出生"证明了希特勒必定会失败". 当然"祸兮福之所倚,福兮祸之所伏",正如有人指出的那样,如果他没有流亡美国,或许当今的应用数学领域就会缺少几个非常有用而且优美无比的数学方法.

1974 年,他应邀回母校罗兰大学担任客座教授. 然而,刚刚返回故国一个星期左右,他就因心脏病突发离世,享年 81 岁. 至此,他终于结束了流亡生活.

习　题　七

7.1　试利用盖尔定理确定矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 5 & 1 \\ -2 & -1 & 9 \end{bmatrix}$$

的特征值的分布范围,并对盖尔圆进行适当的缩放,以确定特征值是实数还是复数.

7.2　已知矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 20 & 3 & 2 \\ 2 & 10 & 2 \\ 8 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

试利用盖尔定理分别确定矩阵 A 和 A^{T} 的盖尔圆,进而确定 A 的特征值的分布范围.

7.3　以 2 阶矩阵为例,举例说明两个相交的盖尔圆内,两个特征值只在其中一个盖尔圆内而另一个盖尔圆不包含特征值.

7.4　设 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 严格对角占优且对角元都大于零,证明:A 的特征值的实部都大于零.

7.5　设 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 严格对角占优,证明:$\rho(A) < 2\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|a_{ii}|$.

7.6　设 $A = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$,求解广义特征值问题 $Ax = \lambda Bx$.

7.7　设 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是 Hermite 矩阵,且 λ_1 和 λ_n 分别是 A 的最小特征值和最大特征值,则

$$\lambda_1 \leqslant a_{kk} \leqslant \lambda_n \quad (k = 1,2,\cdots,n)$$

习题答案与提示

习 题 一

1.1 提示:定理 1.1.1 的证明需分别考虑三类变换,定理 1.1.2 的证明可使用定理 1.1.1 及归纳法.

1.2 设 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$, 对 $\boldsymbol{U}$ 做数乘变换 $r_i\left(\frac{1}{u_{ii}}\right)$, 即将 $\boldsymbol{U}$ 变换成所求的单位上三角矩阵,此时 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn})$.

1.3 (1) $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&0&0\\ \frac{1}{2}&1&0\\ \frac{1}{2}&-1&1\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}2&3&4\\ 0&-\frac{1}{2}&7\\ 0&0&-1\end{pmatrix}$; $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$, 其余同前;

(2) $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&0&0\\ \frac{3}{2}&1&0\\ 2&-6&1\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}2&3&4\\ 0&\frac{1}{2}&-4\\ 0&0&-2\end{pmatrix}$; $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}_{13}$, $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&0&0\\ \frac{3}{4}&1&0\\ \frac{1}{2}&\frac{6}{11}&1\end{pmatrix}$,

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}4&3&30\\ 0&\frac{11}{4}&-\frac{41}{2}\\ 0&0&\frac{2}{11}\end{pmatrix};$$

(3) $\Delta_3=0$, 无 LU 分解; $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&1\\ 4&2&0\\ 6&3&2\end{pmatrix}$; $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}_{13}$, $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&0&0\\ \frac{2}{3}&1&0\\ \frac{1}{3}&0&1\end{pmatrix}$,

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}6&3&2\\ 0&0&-\frac{4}{3}\\ 0&0&\frac{1}{3}\end{pmatrix};$$

(4) $\Delta_3=0$，无 LU 分解；$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}_{23}$，$\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&0&0\\1&1&0\\\frac{1}{2}&\frac{1}{2}&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}2&-1&3\\0&5&-1\\0&0&0\end{pmatrix}$.

1.4 利用习题 1.3(1)的结果，$\boldsymbol{y}=(1,-7.5,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x}=(1,1,-1)^{\mathrm{T}}$.

1.5 $\Delta_1=0$，无 LU 分解；$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}$.

1.6 设 $\boldsymbol{A}$ 的 r 阶顺序主子矩阵 $\boldsymbol{A}_r$ 的 LU 分解为 $\boldsymbol{A}_r=\boldsymbol{L}_r\boldsymbol{U}_r$，将 $\boldsymbol{A}$ 分块为 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_r&\boldsymbol{A}_{12}\\\boldsymbol{A}_{21}&\boldsymbol{A}_{22}\end{pmatrix}$，由于 $r(\boldsymbol{A}_r)=r(\boldsymbol{A})=r$，因此 $\boldsymbol{A}$ 的后 $n-r$ 行可由前 r 行线性表示，即存在 $(n-r)\times r$ 阶矩阵 $\boldsymbol{K}$，使得 $(\boldsymbol{A}_{21},\boldsymbol{A}_{22})=\boldsymbol{K}(\boldsymbol{A}_{11},\boldsymbol{A}_{12})$，即 $\boldsymbol{A}_{21}=\boldsymbol{K}\boldsymbol{A}_r$，$\boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{K}\boldsymbol{A}_{12}$，因此

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{K}&\boldsymbol{I}_{n-r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{A}_r&\boldsymbol{A}_{12}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{L}_r&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{K}\boldsymbol{L}_r&\boldsymbol{I}_{n-r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_r&\boldsymbol{L}_r^{-1}\boldsymbol{A}_{12}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{L}_r&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{K}\boldsymbol{L}_r&\boldsymbol{O}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{U}_r&\boldsymbol{L}_r^{-1}\boldsymbol{A}_{12}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}_{n-r}\end{pmatrix}$$

此即 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$，且 $\boldsymbol{L}$ 或 $\boldsymbol{U}$ 是可逆矩阵.

1.7 $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}\sqrt{5}&0&0\\-\frac{2}{\sqrt{5}}&\sqrt{\frac{11}{5}}&0\\0&-\sqrt{\frac{5}{11}}&\sqrt{\frac{6}{11}}\end{pmatrix}$.　**1.8** $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1&&&\\1&1&&\\&1&1&\\&&0.5&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}1&1&&\\&1&1&\\&&2&1\\&&&3.5\end{pmatrix}$.

1.9 提示：对式 (1.2.13) 两边取行列式即可.

1.10 由于 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{O}\\-\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&-\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}$

因此

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&-\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m&\boldsymbol{A}\\\boldsymbol{O}&\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}&\boldsymbol{O}\\\boldsymbol{B}&\boldsymbol{I}_n\end{pmatrix}$$

两边取行列式即可. 当时，记 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\beta}$，则 $|\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}|=1-\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\beta}$.

1.11 设 $\boldsymbol{V}_n=\boldsymbol{V}_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 的逆矩阵为 $\boldsymbol{W}_n=(w_{ij})_{n\times n}$，则

$$w_{ij}=\frac{\sigma_{n-j}(x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n)}{(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}\quad(i,j=1,2,\cdots,n)$$

其中，$\sigma_k=\sigma_k(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 表示从 n 个数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 中每取 k 个的所有可能之积之和，且规定 $\sigma_0=1$.

例如 4 阶范德蒙德矩阵 $\boldsymbol{V}_4$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{W}_4$ 为

$$\begin{pmatrix}
\frac{x_2x_3x_4}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} & \frac{x_2x_3+x_2x_4+x_3x_4}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} & \frac{x_2+x_3+x_4}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} & \frac{1}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)}\\
\frac{x_1x_3x_4}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)} & \frac{x_1x_3+x_1x_4+x_3x_4}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)} & \frac{x_1+x_3+x_4}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)} & \frac{1}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)}\\
\frac{x_1x_2x_4}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} & \frac{x_1x_2+x_1x_4+x_2x_4}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} & \frac{x_1+x_2+x_4}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} & \frac{1}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)}\\
\frac{x_1x_2x_3}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)} & \frac{x_1x_2+x_1x_3+x_2x_3}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)} & \frac{x_1+x_2+x_3}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)} & \frac{1}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)}
\end{pmatrix}$$

习　题　二

2.1　(1) $\left(\frac{5}{4},\frac{1}{4},-\frac{1}{4},-\frac{1}{4}\right)^{\mathrm{T}}$；(2) $(1,0,-1,0)^{\mathrm{T}}$.

2.2　(1) $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&2&2\end{pmatrix}$；(2) $c(-2,3,1)^{\mathrm{T}}$，c 为任意常数.

2.3　(1)是；(2)是；(3)不是.　**2.4**　略.　**2.5**　略.

2.6　必要性. 划分 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$，因为 $\boldsymbol{\alpha}_i\in R(\boldsymbol{A})=R(\boldsymbol{AB})$，所以存在 $\boldsymbol{x}_i\in\mathbb{C}^k$，使得 $\boldsymbol{\alpha}_i=(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{x}_i$，故

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(\boldsymbol{ABx}_1,\boldsymbol{ABx}_2,\cdots,\boldsymbol{ABx}_n)=\boldsymbol{AB}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)=\boldsymbol{ABC}$$

其中，$\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n)$.

充分性. 设任意 $\boldsymbol{x}\in R(\boldsymbol{A})=R(\boldsymbol{ABC})$，则存在 $\boldsymbol{y}\in\mathbb{C}^n$，使得 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{ABC})\boldsymbol{y}=\boldsymbol{AB}(\boldsymbol{Cy})\in R(\boldsymbol{AB})$，因此 $R(\boldsymbol{A})\subset R(\boldsymbol{AB})$. 同理，对任意存在 $\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^k$，使得 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{z}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Bz})\in R(\boldsymbol{A})$，故 $R(\boldsymbol{AB})\subset R(\boldsymbol{A})$. 于是 $R(\boldsymbol{A})=R(\boldsymbol{AB})$.

2.7　设 $k_1\cdot1+k_2\cdot x+k_3\cdot x^2+\cdots+k_n\cdot x^{n-1}=0$，任取两两不等的一组数 $x_1,x_2,\cdots,x_n\in\mathbb{R}$，则有

$$k_1\cdot1+k_2\cdot x_i+k_3\cdot x_i^2+\cdots+k_n\cdot x_i^{n-1}=0\quad(i=1,2,\cdots,n)$$

记 $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2,\cdots,k_n)^{\mathrm{T}}$，则上式即为矩阵方程 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$，其中 $\boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)$. 由于 $\boldsymbol{V}$ 可逆，因此矩阵方程只有零解，即 $k_1=k_2=\cdots=k_n=0$.

2.8　(1) 若条件(a)与(b)成立，而条件(c)不成立，则 $\boldsymbol{Pk}=\boldsymbol{0}$ 有非零解 $k=(k_1,k_2,\cdots,k_n)^{\mathrm{T}}$，于是

$$k_1\boldsymbol{\beta}_1+k_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\beta}_n=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{k}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{Pk}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{0}=\boldsymbol{\theta}$$

即 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 线性相关，这与条件(b)矛盾.

(2)若条件(a)与(c)成立，而条件(b)不成立，则存在不全为零的一组数，使得

$$k_1\boldsymbol{\beta}_1+k_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\beta}_n=\boldsymbol{\theta}$$

令 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{Pk}$，这里 $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2,\cdots,k_n)^{\mathrm{T}}$，显然 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\neq\boldsymbol{0}$，故

$$y_1\boldsymbol{\alpha}_1+y_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+y_n\boldsymbol{\alpha}_n=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)y=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{Pk}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{k}=\boldsymbol{\theta}$$

即 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 线性相关，这与条件(a)矛盾.

(3)若条件(b)与(c)成立，而条件(a)不成立，则存在不全为零的一组数，使得

$$k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\alpha}_n=\boldsymbol{\theta}$$

令 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{k}$，这里 $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2,\cdots,k_n)^{\mathrm{T}}$，显然 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^{\mathrm{T}}\neq\boldsymbol{0}$，故

$$y_1\boldsymbol{\beta}_1+y_2\boldsymbol{\beta}_2+\cdots+y_n\boldsymbol{\beta}_n=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{PP}^{-1}\boldsymbol{k}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{k}=\boldsymbol{\theta}$$

即 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 线性相关，这与条件(b)矛盾.

2.9 (1) $\boldsymbol{P}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&1&-1&-1\\1&5&-1&-1\\0&-4&4&0\\1&1&-1&3\end{pmatrix}$；(2) $(3,2,-1,0)^{\mathrm{T}}$ 和 $\left(4,-\frac{1}{2},-1,-\frac{3}{2}\right)^{\mathrm{T}}$；

(3)零矩阵 $\boldsymbol{O}=\begin{pmatrix}0&0\\0&0\end{pmatrix}$.

2.10 (1) $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&2&-1\\1&-1&2\\-1&0&-1\end{pmatrix}$；(2) $(1,1,1)^{\mathrm{T}}$.

2.11 必要性.设 $\boldsymbol{\alpha}$ 在两组基下的坐标向量分别为 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$，则由 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{y}$ 知 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}=1\cdot\boldsymbol{x}$.由于 $\boldsymbol{\alpha}\neq\boldsymbol{\theta}$，因此 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$，故 1 为矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的特征值.

充分性.设特征值 1 对应的非零特征向量为 $\boldsymbol{x}$，则 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$.令 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{x}$，显然 $\boldsymbol{\alpha}\neq\boldsymbol{\theta}$，否则 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，出现矛盾.由于 $\boldsymbol{\alpha}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{x}$，故 $\boldsymbol{\alpha}$ 即为所求.

2.12 标准基为 $\boldsymbol{E}_{12}-\boldsymbol{E}_{21},\boldsymbol{E}_{13}-\boldsymbol{E}_{31},\cdots,\boldsymbol{E}_{1n}-\boldsymbol{E}_{n1},\boldsymbol{E}_{23}-\boldsymbol{E}_{32},\cdots,\boldsymbol{E}_{n-1,n}-\boldsymbol{E}_{n,n-1}$.

2.13 略.

2.14 (1)是；(2)是；(3)是.　**2.15** (1)不是；(2)不是；(3)不是.

2.16 (1)略；(2) $\begin{pmatrix}-1&1\\0&1\end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$，$\dim U=2$，$U=\begin{pmatrix}-a&a\\b&a\end{pmatrix}$，$a,b\in\mathbb{R}$.　**2.17** 略.

2.18 $V_1\cap V_2$ 的基为 $\boldsymbol{\beta}_2$，维数为 1，V_1+V_2 的基为 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\beta}_1$，维数为 3.

2.19 (1)提示：$\dim V_1\cap V_2=\dim V_1+\dim V_2-\dim(V_1+V_2)>n-\dim(V_1+V_2)>0$，其中 $V_1+V_2\subset V$，因此 $\dim(V_1+V_2)<n$.也可使用反证法.

(2)设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 为 V_1 的一组基，若有 $\boldsymbol{\alpha}\in V_2-V_1$，则 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r,\boldsymbol{\alpha}$ 线性无关(否则 $\boldsymbol{\alpha}$ 可由 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$ 线性表示，从而 $\boldsymbol{\alpha}\in V_1$，矛盾)，即 $\dim V_2=r+1>r=\dim V_1$，与 $\dim V_1=\dim V_2$ 矛盾.

(3)设 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2\in V$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V-V_1$，$\boldsymbol{\alpha}_2\in V-V_2$，则当 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V-V_2$ 时取 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1$；当 $\boldsymbol{\alpha}_2\in V-V_1$ 时取 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_2$；当 $\boldsymbol{\alpha}_1\in V_2$ 且 $\boldsymbol{\alpha}_2\in V_1$ 时，取 $\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{\alpha}_1+\boldsymbol{\alpha}_2$，则必有 $\boldsymbol{\alpha}\in V-V_1$ (否则 $\boldsymbol{\alpha}_1=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}_2\in V_1$，矛盾)以及 $\boldsymbol{\alpha}\in V-V_2$ (否则 $\boldsymbol{\alpha}_2=\boldsymbol{\alpha}-\boldsymbol{\alpha}_1\in V_2$，矛盾).

2.20 $f(t)=a_0+a_1t+a_2t^2+a_3t^3=\frac{a_1}{2}(-1+2t-t^3)+\frac{a_2}{2}(-1+2t^2-t^3)$

(1) $\dim U=2$，且 U 的一组基为 $f_1(t)=-1+2t-t^3$，$f_2(t)=-1+2t^2-t^3$；

(2) $f_1(t)=(1,t,t^2,t^3)\boldsymbol{\alpha}_1$，$f_2(t)=(1,t,t^2,t^3)\boldsymbol{\alpha}_2$，其中 $\boldsymbol{\alpha}_1=(-1,2,0,-1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(-1,0,2,-1)^{\mathrm{T}}$，由于 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{e}_3,\boldsymbol{e}_4$ 线性无关，因此 $f_3(t)=(1,t,t^2,t^3)\,\boldsymbol{e}_3=t^2$，$f_4(t)=(1,t,t^2,t^3)\,\boldsymbol{e}_4=t^3$，故所求为补子空间为 $W=\{f(t)\mid f(t)=at^2+bt^3\}$.

2.21 提示：$V_1=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1})$，$V_2=\mathrm{span}(\boldsymbol{\beta})$，其中 $\boldsymbol{\alpha}_1=(-1,1,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(-1,0,1,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}},\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1}=(-1,0,\cdots,0,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\beta}=(1,1,\cdots,1)^{\mathrm{T}}$

由于 $|\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1},\boldsymbol{\beta}|=(-1)^{n+1}n\neq0$，所以 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1},\boldsymbol{\beta}$ 线性无关，且是

$\mathbb{R}^n$ 的一组基，其中的 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_{n-1}$ 是 V_1 的一组基，$\boldsymbol{\beta}$ 是 V_2 的一组基，因此 $\mathbb{R}^n = V_1 \oplus V_2$.

2.22 (1)不是，例如 $\mathcal{T}(2,0,0) \neq 2\mathcal{T}(1,0,0)$；(2)是；(3)是. **2.23** 略.

2.24 对任意 $\boldsymbol{\alpha} = k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n \in V$，定义 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) = k_1\boldsymbol{\beta}_1 + k_2\boldsymbol{\beta}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\beta}_n$，易证 $\mathcal{T}$ 是线性变换. 对于 $k_1\boldsymbol{\beta}_1 + k_2\boldsymbol{\beta}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\beta}_n = \boldsymbol{\theta}$，由于

$$\boldsymbol{\theta} = k_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1) + k_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2) + \cdots + k_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n) = \mathcal{T}(k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n)$$

因此当 $\mathcal{T}$ 可逆时，此即 $k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n = \mathcal{T}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\theta}$，结合 $\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$ 是 V 的一组基，可知 $k_1 = k_2 = \cdots = k_n = 0$，即 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 也是 V 的基.

反之，$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\theta}$ 即 $k_1\boldsymbol{\beta}_1 + k_2\boldsymbol{\beta}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\beta}_n = \boldsymbol{\theta}$，由于 $\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$ 也是 V 的基，因此 $k_1 = k_2 = \cdots = k_n = 0$，故 $\boldsymbol{\alpha} = k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n = \boldsymbol{\theta}$，从而 $\mathcal{T}$ 是可逆的.

2.25 考察 $x_1\boldsymbol{\alpha} + x_2\mathcal{T}\boldsymbol{\alpha} + \cdots + x_n\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$，两边做 $n-1$ 次 $\mathcal{T}$ 变换，由于 $\mathcal{T}^l\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$，$l \geqslant n$，因此 $x_1\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha} + x_2\mathcal{T}^n\boldsymbol{\alpha} + \cdots + x_n\mathcal{T}^{2n-2}\boldsymbol{\alpha} = \mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}$ 即 $x_1\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\theta}$，由于 $\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha} \neq \boldsymbol{\theta}$，因此 $x_1 = 0$. 类似地，可证 $x_2 = x_3 = \cdots = x_n = 0$.

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}\boldsymbol{\alpha},\cdots,\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha}) = (\boldsymbol{\alpha},\mathcal{T}\boldsymbol{\alpha},\cdots,\mathcal{T}^{n-1}\boldsymbol{\alpha})\boldsymbol{A}，其中 \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ 1 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

2.26 (1) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -2 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \end{pmatrix}$；(2) $(-1,0,2)^{\mathrm{T}}$ 及 $(1,-1,3)^{\mathrm{T}}$.

2.27 取 U 的一组基 $\boldsymbol{X}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{X}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{X}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，则 $\mathcal{T}$ 在这组基下的矩阵为

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{PJP}^{-1}$，其中 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$，则所求为

$$\boldsymbol{Y}_1 = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\boldsymbol{Y}_2 = -\boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},\boldsymbol{Y}_3 = -\boldsymbol{X}_2 + \boldsymbol{X}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

2.28 $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 的维数为 1，基为 $\boldsymbol{\beta} = (-1,-1,0,1)^{\mathrm{T}}$，$\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 的维数为 3，一组基为

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = (1,1,0)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_2 = (-1,0,1)^{\mathrm{T}},\boldsymbol{\alpha}_3 = (1,-1,1)^{\mathrm{T}}$$

提示：$\mathcal{T}(\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\boldsymbol{e}_3,\boldsymbol{e}_4) = (\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k})\boldsymbol{A}$，这里

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},\ \mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{\beta}),\ \mathrm{Im}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$$

2.29 (1) $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-3&-2&-6\\-11&-5&-13\\6&3&8\end{pmatrix}$; (2) $(-16,5,-10)^{\mathrm{T}}$.

提示：设 $(f_1,f_2,f_3)=(1,t,t^2)\boldsymbol{P}_1$，$(g_1,g_2,g_3)=(1,t,t^2)\boldsymbol{P}_2$，$\mathcal{T}(g_1,g_2,g_3)=(1,t,t^2)\boldsymbol{B}$，$(g_1,g_2,g_3)=(f_1,f_2,f_3)\boldsymbol{P}$，$\mathcal{T}(f_1,f_2,f_3)=(f_1,f_2,f_3)\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_1^{-1}\boldsymbol{P}_2$，且 $\mathcal{T}(f_1,f_2,f_3)=\mathcal{T}(g_1,g_2,g_3)\boldsymbol{P}^{-1}=(1,t,t^2)\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}^{-1}=(f_1,f_2,f_3)\boldsymbol{P}_1^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_2^{-1}\boldsymbol{P}_1$，于是 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}_1^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_2^{-1}\boldsymbol{P}_1$.

设 $f(t)=(1,t,t^2)\boldsymbol{x}$，$\mathcal{T}(f(t))=(1,t,t^2)\boldsymbol{y}$，则 $\mathcal{T}(f(t))=\mathcal{T}(1,t,t^2)x=\mathcal{T}(g_1,g_2,g_3)\boldsymbol{P}_2^{-1}\boldsymbol{x}=(1,t,t^2)\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_2^{-1}\boldsymbol{x}$，因此 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}_2^{-1}\boldsymbol{x}$.

2.30 (1) $\mathrm{Ker}(\mathcal{T})$ 的维数为 1，基为 $1+t+t^2$，$\mathrm{Im}(\mathcal{T})$ 的维数为 2，基为 $1-t^2$，$-1+t$；(2)不存在.

提示：$\mathcal{T}$ 在标准基 $1,t,t^2$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&-1&0\\0&1&-1\\-1&0&1\end{pmatrix}$，$\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A})=\mathrm{span}(\boldsymbol{\beta})$，$\mathrm{Im}(\boldsymbol{A})=\mathrm{span}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)$，其中 $\boldsymbol{\beta}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_1=(1,0,-1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{\alpha}_2=(-1,1,0)^{\mathrm{T}}$.
矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有一对共轭特征值，因此 $\boldsymbol{A}$ 不可实对角化.

2.31 (1) $\boldsymbol{A}=\dfrac{1}{3}\begin{pmatrix}1&1\\-7&5\end{pmatrix}$; (2) $(0,-4)^{\mathrm{T}}$.

提示：$T(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，$T(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$，因此

$\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{F}=(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)\boldsymbol{G}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{P}\boldsymbol{G}$，即 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{P}\boldsymbol{G}\boldsymbol{F}^{-1}$，从而 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{G}\boldsymbol{F}^{-1}$.
$\boldsymbol{\beta}_1=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)p_1$，则 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}_1)=\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)p_1=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{A}p_1$.

2.32 略.

2.33 (1)对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in V_\lambda$，有 $\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2(\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{T}_2\mathcal{T}_1(\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{T}_2(\lambda\boldsymbol{\alpha})=\lambda\mathcal{T}_2(\boldsymbol{\alpha})$，因此 $\mathcal{T}_2(\boldsymbol{\alpha})\in V_\lambda$.

(2)由于 $\dim V_\lambda\geqslant 1$，因此由(1)，存在数 μ 和非零向量 $\boldsymbol{\beta}\in V_\lambda$，使得 $\mathcal{T}_2\boldsymbol{\beta}=\mu\boldsymbol{\beta}$. 又由于 $\boldsymbol{\beta}\in V_\lambda$，因此 $T_1\boldsymbol{\beta}=\lambda\boldsymbol{\beta}$，故 $\boldsymbol{\beta}\in$ 是所求的公共特征向量.

(3)对任意 $\boldsymbol{\beta}\in R(\mathcal{T}_2)$，存在 $\boldsymbol{\alpha}\in V$，使得 $\boldsymbol{\beta}=\mathcal{T}_2\boldsymbol{\alpha}$，从而

$$\mathcal{T}_1\boldsymbol{\beta}=\mathcal{T}_1(\mathcal{T}_2\boldsymbol{\alpha})=(\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2)\boldsymbol{\alpha}=(\mathcal{T}_2\mathcal{T}_1)\boldsymbol{\alpha}=\mathcal{T}_2(\mathcal{T}_1\boldsymbol{\alpha})\in R(\mathcal{T}_2);$$

对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in N(\mathcal{T}_2)$，有 $\mathcal{T}_2(\boldsymbol{\alpha})=\theta$，从而

$$\mathcal{T}_2(\mathcal{T}_1\boldsymbol{\alpha})=(\mathcal{T}_2\mathcal{T}_1)\boldsymbol{\alpha}=(\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2)\boldsymbol{\alpha}=\mathcal{T}_1(\mathcal{T}_2\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{T}_1(\theta)=\theta$$

故 $\mathcal{T}_1\boldsymbol{\alpha}\in N(\mathcal{T}_2)$.

2.34 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 4,2,2，特征向量为 $\boldsymbol{p}_1=(1,2,1)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{p}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{p}_3=(-1,0,1)^{\mathrm{T}}$，因此所求为

$V_1=\mathrm{span}(\boldsymbol{p}_1)$，$V_2=\mathrm{span}(\boldsymbol{p}_2)$，$V_3=\mathrm{span}(\boldsymbol{p}_3)$ 及 V_1+V_2，V_1+V_3，V_2+V_3
并且 $\mathbb{R}^3=V_1\oplus V_2\oplus V_3$.

2.35 (1) $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1&2&0\\0&1&0\\-1&-2&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$；(2) $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}-2&4&3\\1&-1&-1\\1&-2&-1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{J}=\begin{pmatrix}-3&0&0\\0&1&1\\0&0&1\end{pmatrix}$；

(3) $P = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ -1 & -2 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, J = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$；(4) $P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -3 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}, J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

2.36 A_i 的 Jordan 标准型为 $P_i^{-1}A_iP_i = J_i\ (i=1,2)$，其中

$$P_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -4 & 0 \end{pmatrix}, J_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, P_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, J_1 = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

因此 A 的 Jordan 标准型为 $P^{-1}AP = J$, 其中 $P = \mathrm{diag}(P_1, P_2)$, $J = \mathrm{diag}(J_1, J_2)$.

2.37 $x_1(t) = -\mathrm{e}^{2t}(C_1 + C_2 + C_3 + C_3t), x_2(t) = \mathrm{e}^{2t}(C_1 + 2C_2 + 2C_3t), x_3(t) = \mathrm{e}^{2t}(C_2 + C_3t)$，其中 $C_1, C_2, C_3 \in \mathbb{C}$.

2.38 A 的特征值为 $\lambda = 2$（三重），计算可得 $r_0 = 3, r_1 = 1, r_2 = r_3 = 0$, $d_1 = 2, d_2 = 1, d_3 = 0$, $\delta_1 = 1, \delta_2 = 1$.

令 $B = A - 2I$, 由于 $B^2 = O$, 故取 $p_1 = (1,0,0)^{\mathrm{T}}$, 则长为 2 的 Jordan 链为

$$\{p_1 = (1,0,0)^{\mathrm{T}}, Bp_1 = (-6,-12,-6)^{\mathrm{T}}\}$$

取 $p_2 = (2,0,3)^{\mathrm{T}}$ 满足 $Bx = 0$, 则另一个长为 1 的 Jordan 链就是为 $\{p_2\}$.

2.39 证明 k 阶 Jordan 块 $J_k(\lambda)$ 与 $J_k^{\mathrm{T}}(\lambda)$ 相似即可. 事实上，取 $P = (e_k, e_{k-1}, \cdots, e_1)$，其中 e_i 为 k 阶单位矩阵 I_k 的第 i 列, $i = 1,2,\cdots,k$, 易知 $P^{-1}J_k(\lambda)P = J_k^{\mathrm{T}}(\lambda)$.

2.40 $\begin{pmatrix} 14 & -21 & -42 \\ -21 & 14 & 42 \\ 0 & 0 & -7 \end{pmatrix}$.

2.41 设 $\varphi(\lambda) = |\lambda I - A| = \lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + a_1\lambda + a_0$. 因为 A 可逆，所以 $a_0 = (-1)^n|A| \neq 0$. 由 Cayley-Hamilton 定理, $\varphi(A) = A^n + a_{n-1}A^{n-1} + \cdots + a_1A + a_0I = O$, 因此

$$A(A^{n-1} + a_{n-1}A^{n-2} + \cdots + a_1I) = -a_0I$$

从而所求即为

$$A^{-1} = \frac{1}{-a_0}(A^{n-1} + a_{n-1}A^{n-2} + \cdots + a_1I) = \frac{(-1)^{n+1}}{|A|}(A^{n-1} + a_{n-1}A^{n-2} + \cdots + a_1I)$$

2.42 分别为 $m(\lambda) = (\lambda-2)^2$ 和 $m(\lambda) = (\lambda-3)(\lambda-1)$.

习 题 三

3.1 $c(-4,0,-1,3)^{\mathrm{T}}, 0 \neq c \in \mathbb{R}$.

3.2 考察 $k_1\alpha_1 + k_2\alpha_2 + l_1\beta_1 + l_2\beta_2 = 0$, 两边分别用 α_1, α_2 做内积，注意到 $(\alpha_i, \beta_j) = 0$ $(i,j = 1,2)$，则

$$k_1(\alpha_1, \alpha_1) + k_2(\alpha_1, \alpha_2) = 0,\ k_1(\alpha_2, \alpha_1) + k_2(\alpha_2, \alpha_2) = 0$$

根据 Cauchy-Schwartz 不等式，此方程组的系数行列式 $D = (\alpha_1, \alpha_1)(\alpha_2, \alpha_2) - (\alpha_1, \alpha_2)^2 \geqslant 0$，且当 α_1, α_2 线性无关时等号不成立，因此 $D > 0$，解得 $k_1 = k_2 = 0$，从而 $l_1\beta_1 + l_2\beta_2 = 0$. 再由 β_1, β_2 线性无关可知 $l_1 = l_2 = 0$.

3.3 正交基为 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 = (-1,0,1,0)^{\mathrm{T}}, \alpha_4 = (0,-2,0,1)^{\mathrm{T}}$，标准正交基为

$$\varepsilon_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,1,0)^{\mathrm{T}},\varepsilon_2=\frac{1}{\sqrt{5}}(0,1,0,2)^{\mathrm{T}},\varepsilon_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,1,0)^{\mathrm{T}},\varepsilon_4=\frac{1}{\sqrt{5}}(0,-2,0,1)^{\mathrm{T}}$$

3.4 设二阶正交矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，则 $D=|\boldsymbol{A}|=ad-bc=\pm1$，且

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix}d & -b\\ -c & a\end{pmatrix}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}a & c\\ b & d\end{pmatrix}$$

当 $D=1$ 时，显然 $a=d,b=-c$ 且 $a^2+b^2=1$. 令 $a=\cos\theta\,(-\pi\leqslant\theta\leqslant\pi)$，则

$$b=\sin\theta,\ c=-\sin\theta,\ d=\cos\theta$$

当 $D=-1$ 时，显然 $a=-d,b=c$ 且 $a^2+b^2=1$. 令 $a=\cos\theta\,(-\pi\leqslant\theta\leqslant\pi)$，则

$$b=\sin\theta,\ c=\sin\theta,\ d=-\cos\theta$$

3.5 (1) $\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5}\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5}\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 5 & 2\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$；

(2) $\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}}\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}\sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{2}\\ 0 & 0\end{bmatrix}$；

(3) $\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 2\\ 2 & 1 & -1\\ 2 & -2 & 1\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}3 & 1 & 2\\ 0 & 1 & -1\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$；

(4) $\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}\sqrt{2} & 2\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$.

3.6 由例 3.5.6 可知式 (3.2.7) 不正确，正确的结论是 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{R},\times)$.

3.7 (1)不是，正定性不满足；(2)是；(3)不是，齐次性和可加性不满足..

3.8 证明略. $(x_1y_1+2x_2y_2+\cdots+x_ny_n)^2\leqslant(x_1^2+2x_2^2+\cdots+nx_n^2)(y_1^2+2y_2^2+\cdots+ny_n^2)$.

3.9 提示：计算 $\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BA}$ 的对角元.　**3.10** 略.

3.11 (1)由于 $\boldsymbol{\alpha}_1=-\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}_1+\frac{1}{6}\boldsymbol{\beta}_2,\boldsymbol{\alpha}_2=-\frac{3}{2}\boldsymbol{\beta}_1+\frac{1}{6}\boldsymbol{\beta}_2$，则

$$(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_1)=\left(\boldsymbol{\alpha}_1,-\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}_1+\frac{1}{6}\boldsymbol{\beta}_2\right)=2,\ (\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=\left(\boldsymbol{\alpha}_1,-\frac{3}{2}\boldsymbol{\beta}_1+\frac{1}{6}\boldsymbol{\beta}_2\right)=1$$

$$(\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)=1,\ (\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_2)=\left(\boldsymbol{\alpha}_2,-\frac{3}{2}\boldsymbol{\beta}_1+\frac{1}{6}\boldsymbol{\beta}_2\right)=2$$

因此 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix}$. 由于 $(\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2)=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2)\boldsymbol{P}$，其中 $\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}1 & 9\\ -1 & -3\end{pmatrix}$，故

$$B = P^{T}AP = \begin{pmatrix} 2 & 12 \\ 12 & 126 \end{pmatrix}$$

(2) $\varepsilon_1 = (1,1)^T, \varepsilon_2 = (0.5, -1.5)^T$.

3.12 必要性. 因为 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 的度量矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{AP}$，又 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 是 V 的标准正交基，其度量矩阵应为 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$. 所以 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{I}$.

充分性. 由于 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{I}$，因此 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 是 V 的一组基，从而其度量矩阵为 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{AP}$，因此 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \cdots, \boldsymbol{\beta}_n$ 是 V 的标准正交基.

3.13 度量矩阵 $\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 1 & e-2 \\ 1 & \frac{1}{2}(e^2-1) & \frac{1}{4}(e^2+1) \\ e-2 & \frac{1}{4}(e^2+1) & \frac{1}{4}(e^2-1) \end{pmatrix}$ 可逆，因此函数组 x, e^x, xe^x 线性无关.

3.14 $\boldsymbol{Z}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{Z}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

3.15 (1) $f_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}, f_2 = \frac{\sqrt{6}}{2}x, f_3 = \frac{3\sqrt{10}}{4}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right)$；

(2) $f_1 = 1, f_2 = 2\sqrt{3}\left(x - \frac{1}{2}\right), f_3 = 6\sqrt{5}\left(x^2 - x + \frac{1}{6}\right)$；

(3) $f_1 = 1, f_2 = x - 1, f_3 = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1$.

3.16 $\boldsymbol{\alpha}_3 = \frac{1}{3}(-\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3)$.

3.17 (1)设 $\boldsymbol{\alpha} = k_1\boldsymbol{\alpha}_1 + k_2\boldsymbol{\alpha}_2 + \cdots + k_n\boldsymbol{\alpha}_n \neq \theta$，不等式两边用 $\boldsymbol{\alpha}$ 做内积，则 $0 \neq 0$，矛盾；

(2)显然 $(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}) = 0$，再利用(1)的结论.

3.18 提示：$\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_1)\boldsymbol{\alpha}_1 + \cdots + (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_n)\boldsymbol{\alpha}_n$，$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}_1)\boldsymbol{\beta}_1 + \cdots + (\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}_n)\boldsymbol{\beta}_n$.

3.19 设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_k, \boldsymbol{\alpha}_{k+1}, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 为欧氏空间 V 的一组标准正交基.

(1)由 Parseval 等式可知 $\|\boldsymbol{\alpha}\|^2 = \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i)^2 = \sum_{i=1}^{k}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i)^2 + \sum_{i=k+1}^{n}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i)^2 \geqslant \sum_{i=1}^{k}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i)^2$；

(2) $(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\alpha}_i) = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i) - \sum_{j=1}^{k}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_j)(\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_i) = (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i) - (\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}_i)(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i) = 0$.

3.20 $\boldsymbol{\beta}_1 = (-2,2,1,0)^T, \boldsymbol{\beta}_2 = (-1,-1,1,0)^T$.　**3.21** 提示：$V_1^{\perp} = \mathrm{span}(\boldsymbol{\xi})$.　**3.22** 略.

3.23 若有任意 $\boldsymbol{\alpha} \in (V_1 + V_2)^{\perp}$，则 $\boldsymbol{\alpha} \perp (V_1 + V_2)$. 对任意 $\boldsymbol{\beta} \in V_1$，由于 $V_1 \subset (V_1 + V_2)$，因此 $\boldsymbol{\alpha} \perp V_1$，即 $\boldsymbol{\alpha} \in V_1^{\perp}$. 同理 $\boldsymbol{\alpha} \in V_2^{\perp}$，因此 $\boldsymbol{\alpha} \in V_1^{\perp} \cap V_2^{\perp}$；反之，对任意 $\boldsymbol{\alpha} \in V_1^{\perp} \cap V_2^{\perp}$，有 $\boldsymbol{\alpha} \in V_1^{\perp}$ 且 $V_2^{\perp}$，故 $\boldsymbol{\alpha} \perp V_1$ 且 $\boldsymbol{\alpha} \perp V_2$. 于是 $\boldsymbol{\alpha} \perp (V_1 + V_2)$，此即 $\boldsymbol{\alpha} \in (V_1 + V_2)^{\perp}$. 在 $(V_1 + V_2)^{\perp} = V_1^{\perp} \cap V_2^{\perp}$ 中分别用 $V_1^{\perp}$ 换 V_1，用 $V_2^{\perp}$ 换 V_2，即得 $(V_1 \cap V_2)^{\perp} = V_1^{\perp} + V_2^{\perp}$.

3.24 $\boldsymbol{\beta}_1 = (-1,3,1,0)^T, \boldsymbol{\beta}_2 = (-2,3,0,1)^T$ 以及 $\boldsymbol{\alpha}_1 = (2,1,-1,1)^T, \boldsymbol{\alpha}_2 = (1,1,-2,-1)^T$.

3.25 (1)反证法. 假设 $\dim N(\boldsymbol{A}) \cap R(\boldsymbol{A}) = 1$，则对任意非零向量 $\boldsymbol{x} \in N(\boldsymbol{A}) \cap R(\boldsymbol{A})$，有 $\boldsymbol{x} \in N(\boldsymbol{A})$，即 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$.

把 $\boldsymbol{x}$ 扩充为 $R(\boldsymbol{A})$ 的基 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r$，则 $R(\boldsymbol{A})=\text{span}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_r)$，从而

$$R(\boldsymbol{A}^2)=\boldsymbol{A}R(\boldsymbol{A}^2)=\text{span}(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{A\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{A\alpha}_r)=\text{span}(\boldsymbol{A\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{A\alpha}_r)$$

即 $\dim R(\boldsymbol{A}^2)\leqslant n-1$，于是 $\dim R(\boldsymbol{A}^2)=r(\boldsymbol{A}^2)\neq r(\boldsymbol{A})=r$，出现矛盾.

(2)由(1)及 $\dim N(\boldsymbol{A})+\dim R(\boldsymbol{A})=n$ 即知结论成立.

3.26 必要性. 因为 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 有解，因此 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$. 注意到 $\boldsymbol{y}\in N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$，因此 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$，也就是 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$.

充分性. 由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{y}\in N(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=R(\boldsymbol{A})^{\perp}$. 而由 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ 可知 $\boldsymbol{y}\perp\boldsymbol{b}$，因此 $\boldsymbol{b}\in R(\boldsymbol{A})$，即线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 有解.

3.27 (1)结果都是 $\tilde{\boldsymbol{x}}=(2,0)^{\mathrm{T}}$；(2)都无最小二乘解；(3)结果都是 $\tilde{\boldsymbol{x}}=(2.5,-0.5,3.5)^{\mathrm{T}}$.

3.28 (1) $y=\dfrac{15}{14}x+\dfrac{6}{7}$，$y=-\dfrac{30}{181}x^2+\dfrac{705}{362}x+\dfrac{63}{181}$；

(2) $y=\dfrac{2}{13}x+\dfrac{19}{13}$，$y=-\dfrac{1}{6}x^2-\dfrac{79}{78}x+\dfrac{77}{26}$.

3.29 不是正交变换，因为$\mathcal{M}$不是线性变换.

3.30 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}))=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})+k(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha}_0)^2(2+k(\boldsymbol{\alpha}_0,\boldsymbol{\alpha}_0))$，因此 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha})$ 是正交变换当且仅当 $2+k(\boldsymbol{\alpha}_0,\boldsymbol{\alpha}_0)=0$，计算可知 $(\boldsymbol{\alpha}_0,\boldsymbol{\alpha}_0)=1^2+2^2+\cdots+n^2$.

3.31 取 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_3)=\dfrac{1}{3}(\boldsymbol{\alpha}_1+2\boldsymbol{\alpha}_2+2\boldsymbol{\alpha}_3)$ 即可.

3.32 易知必要性. 设 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i)=\boldsymbol{\beta}_i$，由习题 2.24 知，$\mathcal{T}$ 是符合 $\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i)=\boldsymbol{\beta}_i$ 的唯一线性变换，因此 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j))=(\boldsymbol{\beta}_i,\boldsymbol{\beta}_j)=(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)$

对任意 $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}\in V$，设 $\boldsymbol{\alpha}=k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\alpha}_n$，$\boldsymbol{\beta}=l_1\boldsymbol{\alpha}_1+l_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+l_n\boldsymbol{\alpha}_n$，则

$$(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=(k_1\boldsymbol{\alpha}_1+k_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+k_n\boldsymbol{\alpha}_n,l_1\boldsymbol{\alpha}_1+l_2\boldsymbol{\alpha}_2+\cdots+l_n\boldsymbol{\alpha}_n)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}k_il_j(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)$$

$$\begin{aligned}(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))&=(k_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+k_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots+k_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n),l_1\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_1)+l_2\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_2)+\cdots\\&\quad+l_n\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_n))=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}k_il_j(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_i),\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}_j))=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}k_il_j(\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\alpha}_j)\end{aligned}$$

因此 $(\mathcal{T}(\boldsymbol{\alpha}),\mathcal{T}(\boldsymbol{\beta}))=(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$.

3.33 对矩阵 $\boldsymbol{G}_{ij}(\theta)$，令 $\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{H}_2=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{vv}^{\mathrm{T}}$，其中

$$\boldsymbol{u}=\left(0,\cdots,0,\sin\frac{\theta}{4},0,\cdots,0,\cos\frac{\theta}{4},0,\cdots,0\right)^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{v}=\left(0,\cdots,0,\sin\frac{3\theta}{4},0,\cdots,0,\cos\frac{3\theta}{4},0,\cdots,0\right)^{\mathrm{T}}$$

计算可知 $\boldsymbol{G}_{ij}(\theta)=\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1$.

3.34 提示：设 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}$，则 $\tilde{\boldsymbol{H}}=\boldsymbol{I}-2\tilde{\boldsymbol{u}}\tilde{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}}$，其中 $\tilde{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$，且 $\|\tilde{\boldsymbol{u}}\|=\|\boldsymbol{u}\|=1$.

3.35 提示：设 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{uu}^{\mathrm{T}}$，则 $\boldsymbol{GHG}^{-1}=\boldsymbol{I}-2(\boldsymbol{Gu})(\boldsymbol{Gu})^{\mathrm{T}}$，且 $\|\boldsymbol{Gu}\|=\|\boldsymbol{u}\|=1$.

类似地，$\tilde{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{H}\tilde{\boldsymbol{H}}^{-1}=\boldsymbol{I}-2(\tilde{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{u})(\tilde{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}$，且 $\|\tilde{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{u}\|=\|\boldsymbol{u}\|=1$.

3.36 略. **3.37** 提示：直接计算右端即可，注意 $(\boldsymbol{\alpha},i\boldsymbol{\beta})=-i(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})$，$(i\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})=i(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})$.

3.38 提示：即证 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}-\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=0$. 注意若 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，则 $\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_j=a_{ij}$.

3.39 略.

3.40 计算可知 $U^{H}U=(A^{T}A+B^{T}B)+i(A^{T}B-B^{T}A)$，$R^{T}R=\begin{pmatrix}A^{T}A+B^{T}B & -A^{T}B+B^{T}A\\ A^{T}B-B^{T}A & A^{T}A+B^{T}B\end{pmatrix}$，因此矩阵 U 是酉矩阵的充要条件是 $A^{T}A+B^{T}B$ 且 $A^{T}B=B^{T}A$，也就是矩阵 R 是正交矩阵.

3.41 必要性是显然的. 下证充分性. 对 $\|z\boldsymbol{\alpha}+w\boldsymbol{\beta}\|=\|z\boldsymbol{\alpha}\|+\|w\boldsymbol{\beta}\|$ 两边平方并化简，即得 $\mathrm{Re}(z\boldsymbol{\alpha},w\boldsymbol{\beta})=\|z\boldsymbol{\alpha}\|\cdot\|w\boldsymbol{\beta}\|$

注意到 $\|z\boldsymbol{\alpha}\|\cdot\|w\boldsymbol{\beta}\|\geqslant|(z\boldsymbol{\alpha},w\boldsymbol{\beta})|$，故 $\mathrm{Re}(z\boldsymbol{\alpha},w\boldsymbol{\beta})\geqslant|(z\boldsymbol{\alpha},w\boldsymbol{\beta})|$. 由 z,w 的任意性，可知 $(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta})=0$.

3.42 $U=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}i & 1\\ -1 & -i\end{pmatrix}$，$R=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}2 & -i\\ 0 & 1\end{pmatrix}$.

习 题 四

4.1 设 x 为单位特征向量. 由于 A 是正规矩阵，故可将 x 扩充为酉矩阵 $U=(x,u_2,\cdots,u_n)$，使得 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^{H}$，其中 $\Lambda=(\lambda,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，于是

$$A^{H}x=U\bar{\Lambda}U^{H}x=U\bar{\Lambda}e_1=(\bar{\lambda}x,\bar{\lambda}_2u_2,\cdots,\bar{\lambda}_nu_n)e_1=\bar{\lambda}x$$

4.2 略. **4.3** 由例 4.1.4，对 k,l 使用归纳法.

4.4 提示：设 $B=zA+wA^{H}$，直接验算 $B^{H}B=BB^{H}$ 成立.

4.5 提示：设 $B=A-\lambda I$，直接验算 $B^{H}B=BB^{H}$ 成立.

4.6 提示：设 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^{H}$，其中 $\Lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，则由习题 4.1 可知，$A^{H}U=U\bar{\Lambda}$.

4.7 提示：设 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^{H}$，则 $A^{H}=U\bar{\Lambda}U^{H}$. 由 $A=A^2$ 可知 $\Lambda=\Lambda^2$，即 $\lambda_i=0$ 或 1，于是 $\Lambda=\bar{\Lambda}$.

4.8 计算可知 $A^{H}A=(B^{H}B+C^{H}C)+i(B^{H}C-C^{H}B)$，$AA^{H}=(BB^{H}+CC^{H})-i(BC^{H}-CB^{H})$.
必要性. 由 $A^{H}A=AA^{H}$ 知 $BC^{H}-CB^{H}=BC^{H}-CB^{H}$，又 $B^{H}=B$，$C^{H}=C$，故 $BC=CB$.
充分性. 由 $BC=CB$ 及 $B^{H}=B$，$C^{H}=C$，可知 $BC^{H}-CB^{H}=O=BC^{H}-CB^{H}$，且 $B^{H}B+C^{H}C=B^2+C^2=BB^{H}+CC^{H}$，从而 $A^{H}A=AA^{H}$.

4.9 提示：A,B 的谱分解分别为 $A=U\Lambda U^{H}$，$B=UDU^{H}$，其中

$$\Lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n),\ D=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)\quad(d_i^k=\lambda_i,\ i=1,2,\cdots,n)$$

4.10 $A=\lambda_1u_1u_1^{H}+\lambda_2u_2u_2^{H}$，其中

$$\lambda_1=i\sqrt{2},\lambda_2=-i\sqrt{2},u_1=\frac{1}{2}(\sqrt{2},-i,1)^{T},u_2=\frac{1}{2}(\sqrt{2},i,-1)^{T}$$

4.11 提示：对整数 k 使用归纳法. **4.12** 略.

4.13 必要性. $AB=(AB)^{H}=B^{H}A^{H}=BA$. 充分性. $(AB)^{H}=B^{H}A^{H}=BA=AB$.

4.14 提示：充分性. $U^{H}AU=\Lambda$，$V^{H}BV=D$，且 $\Lambda=D$. 故存在酉矩阵 $W=UV^{H}$，使得 $W^{H}AW=B$.

4.15 充分性. 对任意 $x,y\in\mathbb{C}^n$，$x^{H}Ax$、$y^{H}Ay$ 和 $(x+y)^{H}A(x+y)$ 都是实数，因此 $z=x^{H}Ay+y^{H}Ax$ 也是实数. 取 $x=e_j$，$y=e_k$，则 $z=a_{jk}+a_{kj}\in\mathbb{R}$，即元素 a_{jk},a_{kj} 的虚部互为相反数；取 $x=ie_j$，$y=e_k$，则 $z=-ia_{jk}+ia_{kj}\in\mathbb{R}$，即元素 a_{jk},a_{kj} 的实部相等. 因此 $a_{jk}=\bar{a}_{kj}$，即 $A^{H}=A$.

4.16 $|I+U|\neq 0$，否则 -1 为 U 的特征值. 由于 $(I+U)^{-1}(I-U)=(I-U)(I+U)^{-1}$ 且 $U^{\mathrm{H}}U=I$，因此

$$H^{\mathrm{H}}=-i(I+U)^{-H}(I-U)^{\mathrm{H}}=-i(I+U^{\mathrm{H}})^{-1}(I-U)=-i(U^{\mathrm{H}}U+U^{\mathrm{H}})^{-1}(U^{\mathrm{H}}U-U)$$
$$=-i(U+I)^{-1}(U^{\mathrm{H}})^{-1}U^{\mathrm{H}}(U-I)=i(I-U)(I+U)^{-1}=H.$$

同理，$|I-iH|=|(-i)(H+iI)|=|H+iI|\neq 0$，否则 $-i$ 为 H 的特征值，这与 Hermite 矩阵 H 的特征值为实数相矛盾. 由于 $(I+iH)(I-iH)=(I-iH)(I+iH)$ 且 $H^{\mathrm{H}}=H$，因此

$$U^{\mathrm{H}}U=(I-iH)^{-H}(I+iH)^{\mathrm{H}}(I+iH)(I-iH)^{-1}=(I+iH)^{-1}(I-iH)(I+iH)(I-iH)^{-1}$$
$$=(I+iH)^{-1}(I+iH)(I-iH)(I-iH)^{-1}=I$$

4.17 $|I\pm A|\neq 0$，否则 ± 1 为 A 的特征值，这与反 Hermite 矩阵 A 的特征值为纯虚数相矛盾. 注意到 $(I-A)(I+A)=(I+A)(I-A)$，因此

$$C^{\mathrm{H}}C=(I+A)^{-H}(I-A)^{\mathrm{H}}(I-A)^{\mathrm{H}}(I+A)^{-1}=(I-A)^{-1}(I+A)(I-A)(I+A)^{-1}$$
$$=(I-A)^{-1}(I-A)(I+A)(I+A)^{-1}=I$$

而 $C+I=(I-A)(I+A)^{-1}+(I+A)(I+A)^{-1}=2(I+A)^{-1}$，故 $|C+I|\neq 0$，即 -1 不是 C 的特征值.

4.18 提示：即证 $S=(I+A)^{-1}(I-A)$ 是反对称矩阵.

4.19 提示：A 是实对称矩阵，故存在正交矩阵 Q 和实对角矩阵 Λ，使得 $Q^{-1}AQ=\Lambda$，即 $A=Q\Lambda Q^{-1}$. 再由 $A^2=A$ 可知 $\Lambda^2=\Lambda$，即 $\lambda_i=0$ 或 1，于是存在整数 r，使得 $\Lambda=\mathrm{diag}(I_r,O)$.

4.20 提示：存在正交矩阵 Q 和实对角矩阵 Λ，使得 $Q^{-1}AQ=\Lambda$. 再由 $A^2=I$ 可知 $\Lambda^2=I$，即 $\lambda_i=-1$ 或 1，于是存在整数 r，使得 $\Lambda=\mathrm{diag}(I_r,-I_{n-r})$.

4.21 设 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^{\mathrm{H}}$，则 $A^k=U\Lambda^kU^{\mathrm{H}}=O$，因此 $\Lambda^k=O$，即 $\lambda_i=0$，于是 $\Lambda=O$，即 $A=O$.

4.22 $A=\lambda_1u_1u_1^{\mathrm{H}}+\lambda_2u_2u_2^{\mathrm{H}}+\lambda_3u_3u_3^{\mathrm{H}}$，其中

$$\lambda_1=-1,\lambda_2=\lambda_3=3,u_1=\frac{\sqrt{2}}{2}(i,0,-1)^{\mathrm{T}},u_2=\frac{\sqrt{2}}{2}(i,0,1)^{\mathrm{T}},u_3=(0,i,0)^{\mathrm{T}}$$

4.23 对任意 $x\in\mathbb{C}^n$，有 $x^{\mathrm{H}}A^{\mathrm{H}}Ax=\|Ax\|^2\geqslant 0$，且 $\|Ax\|^2=0$ 当且仅当 $Ax=0$，因为 A 列满秩，此即 $x=0$.

4.24 由于 $A>0$，故存在可逆矩阵 Q 使得 $A=Q^{\mathrm{H}}Q$，因此

$$0=|\lambda I-AB|=|\lambda I-Q^{\mathrm{H}}QB|=|Q^{\mathrm{H}}|\cdot|\lambda I-QBQ^{\mathrm{H}}|\cdot|Q|$$

故 AB 与 QBQ^{H} 的特征值相同. 由于 QBQ^{H} 是 Hermite 矩阵，特征值为实数，此即 AB 的特征值为实数. 同理可知 BA 的特征值也为实数.

4.25 设 A 的谱分解为 $A=U\Lambda U^{\mathrm{H}}$，由于 $A\geqslant 0$，故 Λ 的对角元 $\lambda_i\geqslant 0$. 又由 $A^{\mathrm{H}}A=U\Lambda^2U^{\mathrm{H}}=I$，可知 $\Lambda^2=I$，此即 $\lambda_i=1$，也就是 $\Lambda=I$，于是 $A=UIU^{\mathrm{H}}=I$.

4.26 由 $A\geqslant 0$ 可知 A 的特征值 $\lambda_i\geqslant 0$，于是 $I+A$ 的特征值 $1+\lambda_i\geqslant 1$，故 $I+A$ 的所有特征值的乘积不小于 1，即 $|I+A|\geqslant 1$. 显然等号成立时 $I+A$ 的所有特征值都为 1，即 A 的所有特征值都为零，故 $A=O$.

4.27 设 A 的特征值为 $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$，则 $A+tI$ 的特征值为 $\lambda_1+t,\cdots,\lambda_n+t$，取 $t>\max\{|\lambda_1|,\cdots,|\lambda_n|\}$，则 $A+tI$ 的特征值全为正数，即 $A+tI>0$. 类似地，存在

$0 < t < \min\{|\lambda_1|,\cdots,|\lambda_n|\}$，使得 $\boldsymbol{A}-t\boldsymbol{I}<0$.

4.28 由于 $\boldsymbol{A}>0$，故存在可逆 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{H}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}^2$，因此 $\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{ABH}=\boldsymbol{H}^{-1}\boldsymbol{BH}=\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BH}$，即矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 与矩阵 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BH}$ 的特征值相同. 由于 $\boldsymbol{B}>0$，故可得 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BH}>0$，从而 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BH}$ 的特征值全为正数，于是 $\boldsymbol{AB}$ 的特征值全为正数. 注意到 $\boldsymbol{AB}$ 是 Hermite 矩阵，因此 $\boldsymbol{AB}>0$.

4.29 因为 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{H}$ 且 $\boldsymbol{D}_k=|\boldsymbol{H}_k|>0$, $k=1,2,\cdots,n$.

4.30 对任意 $\boldsymbol{\alpha}\in\boldsymbol{V}$，有 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})\in R(\mathcal{P})$，设 $\boldsymbol{\alpha}=\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})+\boldsymbol{\alpha}_2$，则 $\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})=\mathcal{P}^2(\boldsymbol{\alpha})+\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}_2)=\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha})+\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}_2)$，$\mathcal{P}(\boldsymbol{\alpha}_2)=\theta$，即 $\boldsymbol{\alpha}_2\in N(\mathcal{P})$.

4.31 提示：证明 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 是幂等矩阵.　**4.32** 略.　**4.33** 略.

4.34 设投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的谱分解为 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{U\Lambda U}^{\mathrm{H}}$，则由 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}^2$ 可知 $\boldsymbol{\Lambda}=\boldsymbol{\Lambda}^2$，即 $\lambda_i=0$ 或 1.

4.35 由上题，并注意到 $R(\boldsymbol{A})\cap N(\boldsymbol{A})=\{\boldsymbol{0}\}$.

4.36 即证 $\boldsymbol{G}_i=\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$ 是 Hermite 矩阵和幂等矩阵.

4.37 由 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}$ 及 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^2=\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$ 可知 $\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{O}$. 从而

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{B}+\boldsymbol{ABA}=\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{ABA}=\boldsymbol{O},\ \boldsymbol{ABA}+\boldsymbol{BA}^2=\boldsymbol{ABA}+\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{O}$$

两式相减，得 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，因此 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{O}$.

4.38 由 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}$ 及 $(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})^2=\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}$ 可知 $\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BA}=2\boldsymbol{B}$. 从而

$\boldsymbol{BAB}+\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BAB}+\boldsymbol{BA}=2\boldsymbol{B}^2=2\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{AB}^2+\boldsymbol{BAB}=\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BAB}=2\boldsymbol{B}^2=2\boldsymbol{B}$,

两式相减，得 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，因此 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{B}$.

4.39 $(\boldsymbol{AB})^2=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BA})\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{AB}$.

4.40 求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全 SVD 和约化 SVD，其中 $\boldsymbol{A}$ 为：

(1) $\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}-1&0&1\\0&\sqrt{2}&0\\1&0&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1&0&-1\\0&\sqrt{2}&0\\-1&0&-1\end{pmatrix}$，约化 SVD 与完全 SVD 相同；

(2) $\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{\sqrt{2}}{2}&-\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{\sqrt{2}}{2}&-\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&0&\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\sqrt{3}&0\\0&1\\0&0\end{pmatrix}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1&1\\-1&1\end{pmatrix}$,

$\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{\sqrt{2}}{2}\\\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{\sqrt{2}}{2}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\sqrt{3}&0\\0&1\end{pmatrix}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1&1\\-1&1\end{pmatrix}$;

(3) $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{15} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$,

$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \cdot (\sqrt{15} \quad 0) \cdot \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$;

(4) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathrm{i} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$;

(5) $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

4.41 设方阵 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}$，其中 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$ 的对角元全为正数，注意到酉矩阵的特征值为 ± 1，故 $\det\boldsymbol{A} = \det\boldsymbol{U}\det\boldsymbol{\Sigma}\det\boldsymbol{V} = \pm\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n$，即 $|\det\boldsymbol{A}| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n$.

4.42 由于 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{UAV} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}A)\boldsymbol{V}$，因此 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 酉相似，即它们的特征值相同，也就是 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值相同. 若 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$，则 $\boldsymbol{B}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{UU}_1)\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V})$.

4.43 提示：设 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$，可考虑 $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{V} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{U} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$.

4.44 设 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$，其中 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$，这里 $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_n^2$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个实特征值，且 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \geqslant 0$. 因此 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}) = (\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}})$. 令 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{V}_1$，$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}$，$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$，则 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵，且 $\boldsymbol{B}^2 = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$，$\boldsymbol{C}^2 = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$.

习 题 五

5.1 8，$\sqrt{30}$，5.　**5.2** 略.　**5.3** 略.　**5.4** 略.　**5.5** 略.

5.6 (1) $\|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant \sum_i |x_i| \leqslant n\max_i |x_i| = n\|\boldsymbol{x}\|_\infty$，$\|\boldsymbol{x}\|_\infty^2 = \max_i |x_i|^2 \leqslant \sum_i |x_i|^2 = \|\boldsymbol{x}\|_2^2$，

$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \sum_i |x_i|^2 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_\infty^2 = (\sum_i |x_i|)^2 = \|\boldsymbol{x}\|_1^2$；

(2) $\frac{1}{\sqrt{n}}\|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant \frac{1}{n}\|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_2$，$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \sum_i |x_i|^2 \leqslant n\max_i |x_i|^2 \leqslant n\|\boldsymbol{x}\|_\infty^2$；

(3) $\|x\|_2^2 = \sum_i |x_i|^2 \leqslant \max_i |x_i| \sum_i |x_i| = \|x\|_\infty \|x\|_1$.

5.7 略. **5.8** 略. **5.9** 15, $\sqrt{33}$, 12, 8, $\sqrt{5 \pm \sqrt{117}}$, 6.

5.10 (1)对任意 $x \in \mathbb{F}^n$,有 $\|x\| = \|A^{-1}(Ax)\| \leqslant \|A^{-1}\| \cdot \|Ax\|$,特别地,当 $Ax = \lambda x$ 时,$\|x\| = \|A^{-1}(Ax)\| \leqslant \|A^{-1}\| \cdot |\lambda| \cdot \|x\|$,此即 $\|A^{-1}\|^{-1} \leqslant |\lambda|$. 另外有 $|\lambda| \leqslant \rho(A) \leqslant \|A\|$.

(2) $\|A^{-1}\| = \max\limits_{x\neq 0} \dfrac{\|A^{-1}x\|}{\|x\|} = \max\limits_{y\neq 0} \dfrac{\|y\|}{\|Ay\|}$ (令 $y = Ax$) $= \max\limits_{x\neq 0} \dfrac{\|x\|}{\|Ax\|}$.

5.11 提示:$\|A\| \geqslant \|Ae_j\| = \sum\limits_{k=1}^{m} |a_{kj}| \geqslant |a_{ij}|$.

5.12 $\|A^{-1}\|_p \cdot \|A\|_p \geqslant \|A^{-1}A\|_p = \|I\|_p = 1$.

5.13 $\|U\|_2^2 = \lambda_{\max}(U^H U) = \lambda_{\max}(I) = 1$.

5.14 (1)因为 Px 仅仅是重排 x 的各分量的位置,因此 $\|Px\|_p = \|x\|_p$,从而

$$\|P\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|Px\|_p}{\|x\|_p} = 1;$$

(2)设 $d = \max\limits_i |d_i|$,则 $\|Dx\|_p^p = \sum\limits_i |d_i x_i|^p \leqslant d^p \sum\limits_i |x_i|^p$,从而

$$\|D\|_p = \max_{x\neq 0} \frac{\|Dx\|_p}{\|x\|_p} = d.$$

5.15 A 中列和最大的那一列显然就是 A^H 中行和最大的那一行.

5.16 提示:(1) $\|A\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^H A) \leqslant \sum\limits_i \lambda_i (A^H A) = tr(A^H A) = \|A\|_F^2$,

$$\|A\|_F^2 = \lambda_{\max}(A^H A) = \sum_i \lambda_i (A^H A) = \sum_i \sigma_i^2 \leqslant r \cdot \sigma_1^2 = r \cdot \|A\|_2^2;$$

$$\begin{aligned}(2)\ \|A\|_\infty &= \max_i \Big(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big) \leqslant \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \\ &= \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}| \leqslant n \cdot \max_j \Big(\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big) = n \cdot \|A\|_1, \\ \|A\|_1 &= \max_j \Big(\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big) \leqslant \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}| \\ &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \leqslant m \cdot \max_i \Big(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big) = m \cdot \|A\|_\infty;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(3)\ \|A\|_F^2 &= \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|^2 \leqslant \sum_{j=1}^{n} \Big(\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big)^2 \leqslant n \Big(\max_j \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big)^2 = n \cdot \|A\|_1^2, \\ \|A\|_1^2 &= \Big(\max_j \sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big)^2 \leqslant \sum_{j=1}^{n} \Big(\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|\Big)^2 \\ &= \sum_{j=1}^{n} \Big[\Big(\sum_{i=1}^{m} 1\Big) \cdot \Big(\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|^2\Big)\Big] \leqslant m \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{m} |a_{ij}|^2 = m\|A\|_F^2;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(4)\ \|A\|_F^2 &= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{m} \Big(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big)^2 \leqslant m \Big(\max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big)^2 = m \cdot \|A\|_\infty^2, \\ \|A\|_\infty^2 &= \Big(\max_i \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big)^2 \leqslant \sum_{i=1}^{m} \Big(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\Big)^2\end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\Big[\big(\sum_{j=1}^{n}1\big)\cdot\big(\sum_{j=1}^{m}|a_{ij}|^2\big)\Big] \leqslant n\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2 = n\|\boldsymbol{A}\|_F^2;$$

(5) $\|\boldsymbol{A}\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_F \leqslant \sqrt{m}\|\boldsymbol{A}\|_\infty$. 另外,由习题 5.6 可知 $\frac{1}{\sqrt{n}}\|\boldsymbol{x}\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_\infty \leqslant \|x\|_2$,

因此 $\|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}\|_\infty} \leqslant \sqrt{n}\max\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} = \sqrt{n}\|\boldsymbol{A}\|_2$;

(6) $\|\boldsymbol{A}\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_F \leqslant \sqrt{n}\|\boldsymbol{A}\|_1$. 由习题 5.6, $\|\boldsymbol{x}\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|_1 \leqslant \sqrt{n}\|\boldsymbol{x}\|_2$, 注意到 $\boldsymbol{Ax} \in \mathbb{C}^m$, 故 $\|\boldsymbol{A}\|_1 = \max\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_1}{\|\boldsymbol{x}\|_1} \leqslant \sqrt{m}\max\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} = \sqrt{m}\|\boldsymbol{A}\|_2$.

5.17 略.

5.18 (1)
$$\|\boldsymbol{Ax}\|_\infty = \max_i\Big|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\Big| \leqslant \max_i\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\,|x_j| \leqslant \max_i\sum_{j=1}^{n}\big[|a_{ij}|(\max_j|x_j|)\big]$$
$$\leqslant \big(\max_i\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\big)(\max_j|x_j|) \leqslant \big[\max_i(n\cdot\max_j|a_{ij}|)\big]\cdot(\max_j|x_j|)$$
$$\leqslant n(\max_{i,j}|a_{ij}|)\cdot(\max_j|x_j|) = \|\boldsymbol{A}\|_{m_\infty}\|\boldsymbol{x}\|_\infty.$$

(2)
$$\|\boldsymbol{Ax}\|_1 = \sum_{i=1}^{m}\Big|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\Big| \leqslant \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\,|x_j| \leqslant \sum_{i=1}^{m}\Big[\big(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\big)\big(\sum_{j=1}^{n}|x_j|\big)\Big]$$
$$= \big(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\big)\big(\sum_{j=1}^{n}|x_j|\big) = \|\boldsymbol{A}\|_{m_1}\|\boldsymbol{x}\|_1.$$

5.19 (2)
$$\|\boldsymbol{Ax}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m}\Big|\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\Big|^2 \leqslant \sum_{i=1}^{m}\big(\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\cdot\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2\big)$$
$$= \big(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\big)\big(\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2\big) \leqslant mn\cdot\max_{i,j}|a_{ij}|^2\cdot\|\boldsymbol{x}\|_2^2$$
$$= f^2(\boldsymbol{A})\|\boldsymbol{x}\|_2^2;$$

(3) $\|\boldsymbol{Ax}\|_2^2 \leqslant mn\cdot\max_{i,j}|a_{ij}|^2\cdot\|x\|_2^2 \leqslant [\max(m,n)]^2\cdot\max_{i,j}|a_{ij}|^2\cdot\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = g^2(\boldsymbol{A})\|\boldsymbol{x}\|_2^2$,

$$\|\boldsymbol{Ax}\|_\infty^2 \leqslant \max_i\Big|\sum_{k=1}^{n}a_{ik}x_k\Big| \leqslant \max_i\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\,|x_k| \leqslant \big(\max_i\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\big)(\max_j|x_j|)$$
$$\leqslant (n\cdot\max_{i,j}|a_{ij}|)\|x\|_\infty \leqslant [\max(m,n)\cdot\max_{i,j}|a_{ij}|]\|\boldsymbol{x}\|_\infty = g(\boldsymbol{A})\|\boldsymbol{x}\|_\infty.$$

5.20 $c_1\|\boldsymbol{A}\|_\infty = c_1\max_{\|x\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\|_\infty \leqslant \|\boldsymbol{A}\| = \max_{\|x\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\| \leqslant c_2\max_{\|x\|=1}\|\boldsymbol{Ax}\|_\infty = c_2\|\boldsymbol{A}\|_\infty$.

5.21 略.

5.22 $\|\boldsymbol{A}\|_2^2 = \lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = \rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\|_1 \leqslant \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_1\cdot\|\boldsymbol{A}\|_1 = \|\boldsymbol{A}\|_1\cdot\|\boldsymbol{A}\|_\infty$.

5.23 $\|\boldsymbol{UA}\|_2^2 = \lambda_{\max}[(\boldsymbol{UA})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{UA})] = \lambda_{\max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|_2^2$, $\|\boldsymbol{AV}\|_2 = \|(\boldsymbol{AV})^{\mathrm{H}}\|_2 = \|\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_2 = \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\|_2 = \|\boldsymbol{A}\|_2$, 其他类似可证,略去.

5.24
$$\|\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}}\|_2 = \max_{\|z\|_2=\|w\|_2=1}\|w^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}})z\|_2$$
$$= \max_{\|w\|_2=1}|x^{\mathrm{H}}w|\max_{\|z\|_2=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}z| = \|\boldsymbol{x}\|_2\|\boldsymbol{y}\|_2,$$
$$\|\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}}\|_\infty = \max_{\|z\|_\infty=1}\|(\boldsymbol{xy}^{\mathrm{H}})z\|_\infty = \|\boldsymbol{x}\|_\infty\max_{\|z\|_\infty=1}|\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}z| = \|\boldsymbol{x}\|_\infty\|\boldsymbol{y}\|_1.$$

5.25 设 $\boldsymbol{B} = (\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_n)$, 显然 $\|\boldsymbol{Ab}_i\|_2 \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_2\|\boldsymbol{b}_i\|_2$, 因此

$\|AB\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \|Ab_i\|_2^2 \leqslant \|A\|_2^2 \sum_{i=1}^{n} \|b_i\|_2^2 = \|A\|_2^2 \|B\|_F^2.$

同时 $\|AB\|_F = \|(AB)^H\|_F = \|B^H A^H\|_F \leqslant \|B^H\|_2 \|A^H\|_F = \|B\|_2 \|A\|_F$

5.26 (1)设 A 的 Schur 分解为 $A=UTU^H$，则 T 的对角元为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$. 由 F 范数的酉不变性，有 $\|A\|_F = \|UTU^H\|_F = \|T\|_F \geqslant \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2$.

易知等号成立时矩阵 T 为对角矩阵，即 A 为正规矩阵.

(2)显然 $\Delta_F A$ 刻画了矩阵 A 偏离正规矩阵的程度.

5.27 利用习题 5.10 的结论可知 $\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| = \dfrac{\max\limits_{\|x\|=1} \|Ax\|}{\min\limits_{\|x\|=1} \|Ax\|}$. 当 A 是正规矩阵时，$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \|U\Sigma V^H\|_2 \cdot \|V\Sigma^{-1}U^H\|_2 = \|\Sigma\|_2 \cdot \|\Sigma^{-1}\|_2 = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n} = \dfrac{\max\limits_{\lambda\in\sigma(A)} |\lambda|}{\min\limits_{\lambda\in\sigma(A)} |\lambda|}$.

5.28 利用习题 5.16 中的结论(5)和(6).

5.29 (1)提示：设 $a = \max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n} |a_{ij}|$，$\|x\|_2 = 1$，计算 $\|A\|_2^2 = x^H A^H A x$；

(2)提示：利用 $\rho(A) \leqslant \|A\|_2 \leqslant n \max\limits_{1\leqslant i,j\leqslant n} |a_{ij}|$，可知 $\varepsilon \leqslant \|A\|_2 \leqslant 2\varepsilon$，$\varepsilon^{-1} \leqslant \|A^{-1}\|_2 \leqslant 2\varepsilon^{-1}$，从而 $1 \leqslant \kappa_2(A) \leqslant 4$.

习　题　六

6.1 略.　**6.2** 略.　**6.3** (1)收敛，A 的特征值为 $\frac{5}{6}$ 和 $-\frac{1}{2}$；(2) $\|A\|_1 = 0.8$.

6.4 A 的特征值为 $-2a$ 和 a，因此当 $|a| \leqslant 0.5$ 时，矩阵 A 是收敛的.

6.5 (1) $J = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$，$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} J^k$ 发散；(2) $J = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$，$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{4^k} J^k$ 收敛.

6.6 $(I-A)^{-1} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 9 & 7 \\ 6 & 8 \end{pmatrix}$.

6.7 若 Neumann 级数收敛，则 $\sum_{k=0}^{\infty} \|A\|^k$ 收敛，故 $\|A\|^k \to 0$，即 $A^k \to O$，从而 $\rho(A) < 1$. 反之显然成立.

6.8 略.

6.9 $B = I - D^{-1}A = D^{-\frac{1}{2}}(I - D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}})D^{\frac{1}{2}}$，因为 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 也是实对称矩阵，因此 B 的特征值为实数.

必要性. 若 $\rho(B) < 1$，则矩阵 $D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ 的特征值在区间 $(0,2)$ 内，故 $A > 0$. 同理可证 $2D - A > 0$.

充分性. 因为 $A > 0$，其特征值为正数，而 $D^{\frac{1}{2}}(I-B)D^{-\frac{1}{2}} = D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$，因此 $I-B$ 也为正数，即 B 的特征值均小于 1. 同理再利用 $D^{-\frac{1}{2}}(2D-A)D^{-\frac{1}{2}} = D^{\frac{1}{2}}(I+B)D^{-\frac{1}{2}}$，可知 B 的特征值均大于 -1.

6.10 设 $\boldsymbol{B}_{GS}\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v}$，则 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{v}=\lambda(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})\boldsymbol{v}$，两边左乘 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}$，并注意到 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$，得 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{v}$. 令 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{v}=d$，$\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{v}=a+bi$，则 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=a-bi$，所以 $a-bi=\lambda[d-(a+bi)]$. 两边取模，并注意到 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{U})\boldsymbol{v}=d-2a>0$，因此 $a^2+b^2=|\lambda|^2[(d-a)^2+b^2]=|\lambda|^2[d(d-2a)+a^2+b^2]>|\lambda|^2(a^2+b^2)$ 此即 $|\lambda|<1$.

6.11 设 $\lambda\leqslant 0$，考虑矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$. 显然 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 也是严格对角占优矩阵，因此 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 可逆. 由于 λ 的任意性，可知 $\boldsymbol{A}$ 的特征值均大于零，从而 $\boldsymbol{A}>0$.

6.12 若有 $\tilde{x}\in\boldsymbol{x}^{(0)}+\mathcal{K}_k$ 使得 $R(\boldsymbol{x})$ 取极小值. 则对于任意实数 a 和任意向量 $\boldsymbol{v}\in\mathcal{K}_k$，都有

$$\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}(\tilde{x}+a\boldsymbol{v})\|_2^2\geqslant\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\tilde{x}\|_2^2$$

令 $f(a)=\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}(\tilde{x}+a\boldsymbol{v})\|_2^2$，由于 $a=0$ 时 $f(a)$ 取极小值，因此 $f'(0)=0$. 计算可知此即 $(b-\boldsymbol{A}\tilde{x},\boldsymbol{A}\boldsymbol{v})=0$. 由于的任意性，从而上式对 $\mathcal{L}_k=\boldsymbol{A}\mathcal{K}_k$ 都成立，此即 Galerkin 条件的矩阵表达形式.

6.13 $\begin{pmatrix}-\sin t & -\cos t\\ \cos t & -\sin t\end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix}-\sin t & \cos t\\ -\cos t & -\sin t\end{pmatrix}$，0，1.　**6.14** $\begin{pmatrix}1 & 1\\ \sin 1 & 0\end{pmatrix}$.

6.15 (1) $\begin{pmatrix}\lambda & \\ & \lambda(\lambda^2-10\lambda-3)\end{pmatrix}$；(2) $\begin{pmatrix}\lambda-1 & 0\\ 0 & (\lambda-1)^3(\lambda+1)\end{pmatrix}$；(3) $\begin{bmatrix}1 & & \\ & \lambda & \\ & & \lambda(\lambda+1)\end{bmatrix}$.

6.16 $\mathrm{diag}(1,1,\lambda+1,(\lambda+1)(\lambda-1),(\lambda+1)(\lambda-1)^2)$.

6.17 (1) $(\lambda-1)^2$；(2) $(\lambda-1)^3(\lambda-2)^2(\lambda-3)^3$.　**6.18** 略.

6.19 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$，则 $m(\lambda)=\lambda(\lambda-1)$，最小多项式无重根.　**6.20** 略.

6.21 设 $\boldsymbol{S}_m=\sum\limits_{k=0}^{m}\dfrac{1}{k!}\boldsymbol{A}^k$，则 $\lim\limits_{m\to\infty}\boldsymbol{S}_m=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$，且有 $u(S_m)\leqslant\sum\limits_{k=0}^{m}\dfrac{1}{k!}u(\boldsymbol{A}^k)\leqslant\sum\limits_{k=0}^{m}\dfrac{1}{k!}u(\boldsymbol{A})^k\to\mathrm{e}^{u(\boldsymbol{A})}$，以及 $|u(\boldsymbol{S}_m)-u(\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})|\leqslant u(\boldsymbol{S}_m-\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})\to 0$ 因此 $u(\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})=\lim\limits_{m\to\infty}u(\boldsymbol{S}_m)\leqslant\mathrm{e}^{u(\boldsymbol{A})}$.

6.22 略.　**6.23** 因为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=-\boldsymbol{A}$，所以 $(\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}})^{\mathrm{H}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{\boldsymbol{O}}=\boldsymbol{I}$.

6.24 $\boldsymbol{I}\cos 1+\boldsymbol{A}\sin 1$，$\boldsymbol{A}\sin 1$，$\boldsymbol{I}\cos 1$.

6.25 $\begin{bmatrix}\mathrm{e}^t & 0 & 0\\ \mathrm{e}^t-\mathrm{e}^{2t} & \mathrm{e}^{2t} & -t\mathrm{e}^{2t}\\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{2t}\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}\sin 1 & 0 & 0\\ \sin 1-\sin 2 & \sin 2 & -\cos 2\\ 0 & 0 & \sin 2\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ -2 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$，

$$\begin{bmatrix}\arctan\frac{1}{4} & 0 & 0\\ \arctan\frac{1}{4}-\arctan\frac{1}{2} & \arctan\frac{1}{2} & -\frac{1}{5}\\ 0 & 0 & \arctan\frac{1}{2}\end{bmatrix}.$$

6.26 (1) $\begin{bmatrix}(1-2t)\mathrm{e}^{2t} & -t\mathrm{e}^{2t}\\ 4t\mathrm{e}^{2t} & (2t+1)\mathrm{e}^{2t}\end{bmatrix}$，$\dfrac{\sqrt{2}}{4}\begin{pmatrix}2 & -1\\ 4 & 6\end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix}\ln 2-1 & -0.5\\ 2 & \ln 2+1\end{pmatrix}$；

(2) $\begin{bmatrix}\arctan 2 & -\frac{1}{3}\arctan 1+\frac{2}{3}\arctan 2 & -\frac{2}{3}\arctan 1+\frac{1}{3}\arctan 2\\ 0 & 0 & \arctan 1\\ 0 & \arctan 1 & 0\end{bmatrix}$；

(3)$e^{A} = \mathrm{diag}(e^{J_2(1)}, e^{J_3(2)})$，其中 $e^{J_2(1)} = \begin{pmatrix} e^t & te^t \\ & e^t \end{pmatrix}$，$e^{J_3(2)} = \begin{pmatrix} e^{2t} & te^{2t} & \frac{1}{2}t^2e^{2t} \\ & e^{2t} & te^{2t} \\ & & e^{2t} \end{pmatrix}$，

$\sin\boldsymbol{A} = \mathrm{diag}(\sin \boldsymbol{J}_2(1), \sin \boldsymbol{J}_3(2))$，其中 $\sin \boldsymbol{J}_2(1) = \begin{pmatrix} \sin1 & \cos1 \\ & \sin1 \end{pmatrix}$，

$$\sin \boldsymbol{J}_3(2) = \begin{pmatrix} \sin2 & \cos2 & -\frac{1}{2}\sin2 \\ & \sin2 & \cos2 \\ & & \sin2 \end{pmatrix}.$$

6.27 $te^{a}\begin{pmatrix} \cos b & \sin b \\ -\sin b & \cos b \end{pmatrix}$.

6.28 $\boldsymbol{P}^{-1}e^{A}\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} e^2 & 0 & 0 \\ 0 & e & e \\ 0 & 0 & e \end{pmatrix}$，其中 $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$. 令 $\boldsymbol{M} = \mathrm{diag}(1,1,e^{-1})$，则 $\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{PM}$ 即为所求.

同理，$\boldsymbol{P}^{-1}(\sin\boldsymbol{A})\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \sin2 & 0 & 0 \\ 0 & \sin1 & \cos1 \\ 0 & 0 & \sin1 \end{pmatrix}$. 令 $\boldsymbol{N} = \mathrm{diag}(1,1,(\cos1)^{-1})$，则 $\boldsymbol{P}_2 = \boldsymbol{PN}$ 即为所求.

6.29 由于 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 相似，因此 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的 Jordan 标准型相同，且 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 有相同的最小多项式，所以 $f(\lambda)$ 在 $\boldsymbol{A}$ 的谱集 $\sigma(\boldsymbol{A})$ 上有定义，并且 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的多项式 $p(\lambda)$ 可以是相同的，故 $f(\boldsymbol{A}) = p(\boldsymbol{A})$，从而 $f(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = p(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = [p(\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}} = [f(\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}}$

6.30 设 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$，则 $e^{Bt} = \begin{pmatrix} e^{2t} & te^{2t} \\ 0 & e^{2t} \end{pmatrix}$，从而 $e^{At} = (e^{B^{\mathrm{T}}t}) = (e^{Bt})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} e^{2t} & 0 \\ te^{2t} & e^{2t} \end{pmatrix}$.

6.31 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 6 & 9 \\ 4 & 11 \end{pmatrix}$.

6.32 $\int_0^1 \sin(\boldsymbol{A}t)\mathrm{d}t = \boldsymbol{A}^{-1}\int_0^1 [\cos(\boldsymbol{A}t)]'\mathrm{d}t = \boldsymbol{A}^{-1}(\cos\boldsymbol{A} - \boldsymbol{I})$.

6.33 提示：$\frac{\partial|\boldsymbol{A}|}{\partial a_{ij}} = \boldsymbol{A}_{ij}$，$\frac{\partial}{\partial a_{ij}}(\ln|\boldsymbol{A}|) = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\boldsymbol{A}_{ij}$，$\frac{\partial|\boldsymbol{A}^{-1}|}{\partial a_{ij}} = \frac{\partial|\boldsymbol{A}|^{-1}}{\partial a_{ij}} = -|\boldsymbol{A}|^{-2}\boldsymbol{A}_{ij}$.

6.34 设 $\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m)$，则 $f(\boldsymbol{X}) = tr(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BX}) = \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}B\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_2 + \cdots + \boldsymbol{x}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_m$，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{X}}f(\boldsymbol{X}) &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_1}f(\boldsymbol{X}), \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_2}f(\boldsymbol{X}), \cdots, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_m}f(\boldsymbol{X})\right) \\ &= ((\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}_1, (\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}_2, \cdots, (\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}_m) = (\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}.\end{aligned}$$

6.35 $\max\limits_j \sum\limits_{i=1}^m \left|\int_{t_0}^t a_{ij}(s)\mathrm{d}s\right| \leqslant \max\limits_j \sum\limits_{i=1}^m \int_{t_0}^t |a_{ij}(s)|\mathrm{d}s = \int_{t_0}^t \left(\max\limits_j \sum\limits_{i=1}^m |a_{ij}(s)|\right)\mathrm{d}s$，即

$$\left\|\int_{t_0}^t A(s)\mathrm{d}s\right\|_1 \leqslant \int_{t_0}^t \|\boldsymbol{A}(s)\|_1\mathrm{d}s$$

其他类似可证.

6.36 $(x_1(t) = (1+12t)\mathrm{e}^{-t}, x_2(t) = 9t\mathrm{e}^{-t}, x_3(t) = (1-6t)\mathrm{e}^{-t}$.

6.37 (1) $\boldsymbol{x}(t) = (\mathrm{e}^{2t}, \mathrm{e}^{2t}, 0)^{\mathrm{T}}$; (2) $\boldsymbol{x}(t) = \mathrm{e}^{2t}(-2t+\mathrm{e}^{2t}, 2t-\mathrm{e}^{2t}+2, 2t+\mathrm{e}^{2t})^{\mathrm{T}}$.

6.38 $\boldsymbol{x}(t) = (t\mathrm{e}^{10t}, \mathrm{e}^{t}+2t\mathrm{e}^{10t}, \mathrm{e}^{t}-2t\mathrm{e}^{10t})^{\mathrm{T}}$.

6.39 验证可知 $\boldsymbol{X}(t) = (\cos\boldsymbol{A}(t))\boldsymbol{C}_1 + (\sin\boldsymbol{A}(t))\boldsymbol{C}_2$ 是二阶矩阵微分方程的解,其中 $\boldsymbol{C}_1 = \boldsymbol{X}_0, \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{X}_1$.

6.40 $y_1' = y_2, y_2' = 3y_2 - 2y_1$. $x(t) = y_1 = (2c_1 - c_2)\mathrm{e}^{t} + (c_2 - c_1)\mathrm{e}^{2t} = C_1\mathrm{e}^{t} + C_2\mathrm{e}^{2t}$.

习 题 七

7.1 $G_1(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z| \leqslant 1\}, G_2(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z-5| \leqslant 2\}, G_3(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z-9| \leqslant 3\}$.
取 $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(0.5, 1, 1)$,则 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}$ 的三个分离的盖尔圆为

$$G_1'(\boldsymbol{B}) = \{z \mid |z| \leqslant 2\}, G_2'(\boldsymbol{B}) = \{z \mid |z-5| \leqslant 1.5\}, G_3'(\boldsymbol{B}) = \{z \mid |z-9| \leqslant 2\}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 的每个盖尔圆内有且仅有一个特征值,因此矩阵 $\boldsymbol{B}$ 没有复特征值,注意到 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的特征值相同,所以 $\boldsymbol{A}$ 的特征值满足 $-2 \leqslant \lambda_1 \leqslant 2$, $3.5 \leqslant \lambda_2 \leqslant 6.5$, $7 \leqslant \lambda_3 \leqslant 11$.

7.2 $G_1(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z-20| \leqslant 4\}, G_2(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z-10| \leqslant 4\}, G_3(\boldsymbol{A}) = \{z \mid |z| \leqslant 9\}$.
$G_1'(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \{z \mid |z-20| \leqslant 10\}, G_2'(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \{z \mid |z-10| \leqslant 4\}, G_3'(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \{z \mid |z| \leqslant 3\}$.
显然 G_1 孤立,其中含 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值,记作 λ_1,则 $16 \leqslant \lambda_1 \leqslant 24$;$G_3'$ 孤立,其中含 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的一个特征值,它也是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值,记作 λ_3,显然 $-3 \leqslant \lambda_3 \leqslant 3$. 设 $\boldsymbol{A}$ 剩下的特征值为 λ_2,则 $\lambda_2 \in G_2 \cup G_3$,且 $\lambda_2 \in G_1' \cup G_2'$,因此 $\lambda_2 \in (G_2 \cup G_3) \cap (G_1' \cup G_2') = G_2$,即 $6 \leqslant \lambda_2 \leqslant 14$.

7.3 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & -0.4 \\ 0.9 & 1 \end{pmatrix}$.

7.4 对 $\boldsymbol{A}$ 的任意特征值 λ,存在盖尔圆 G_k,使得 $\lambda \in G_k$,即 $|\lambda - a_{kk}| \leqslant R_k < a_{kk}$,因为 $a_{kk} > 0$,故 $0 < \mathrm{Re}(\lambda) < 2a_{kk}$

7.5 $\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant \|\boldsymbol{A}\|_\infty = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}\left(\sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|\right) < \max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}(2|a_{ii}|) = 2\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}|a_{ii}|$.

7.6 $\lambda_1 = 2$, $\boldsymbol{x}_1 = k_1(2,1)^{\mathrm{T}}$ $(k_1 \neq 0)$; $\lambda_2 = -2/3$, $\boldsymbol{x}_2 = k_2(2,-1)^{\mathrm{T}}$ $(k_2 \neq 0)$.

7.7 设 $R(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$ 且 $\|\boldsymbol{x}\|_2 = 1$,则 $\lambda_1 \leqslant R(\boldsymbol{x}) \leqslant \lambda_n$. 取 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_i$ 即单位矩阵的第 i 列,则

$$\lambda_1 \leqslant R(\boldsymbol{e}_i) = a_{ii} \leqslant \lambda_n$$

参考文献

[1] Lay D C. 线性代数及其应用(影印版). 3 版. 北京:电子工业出版社,2010.

[2] Leon S J. 线性代数(影印版). 7 版. 北京:机械工业出版社,2008.

[3] Horn R A ,Johnson C R. 矩阵分析. 杨奇,译. 北京:机械工业出版社,2005.

[4] Lax P. 线性代数及其应用. 2 版. 傅莺莺,沈复兴,译. 北京:人民邮电出版社,2009.

[5] Apostol T M. 线性代数及其应用. 沈灏,沈佳辰,译. 北京:人民邮电出版社,2010.

[6] Axler S. 线性代数应该这样学. 2 版. 杜现昆,马晶,译. 北京:人民邮电出版社,2010.

[7] Birkhoff S. 近世代数概论. 5 版. 王连祥,徐广善,译. 北京:人民邮电出版社,2008.

[8] Bhatia R. 矩阵分析(影印版). 北京:世界图书出版公司,2011.

[9] Greub W. 线性代数(影印版). 4 版. 北京:世界图书出版公司,2009.

[10] 科斯特利金 A И. 代数学引论(第一卷). 2 版. 张英伯,译. 北京:高等教育出版社,2006.

[11] 科斯特利金 A И. 代数学引论(第二卷). 3 版. 牛凤文,译. 北京:高等教育出版社,2008.

[12] Artin M. 代数. 郭晋云,译. 北京:机械工业出版社,2009.

[13] Roman S. Advanced Linear Algebra(影印版). 3rd. 北京:世界图书出版公司,2008.

[14] 北京大学数学系几何与代数教研室前代数小组. 高等代数. 3 版. 北京:高等教育出版社,2003.

[15] 丘维声. 高等代数(下). 北京:清华大学出版社,2010.

[16] 李尚志. 线性代数(数学专业用). 北京:高等教育出版社,2006.

[17] 龚升. 线性代数五讲. 北京:科学出版社,2005.

[18] 刘剑平,施劲松. 线性代数. 上海:华东理工大学出版社,2011.

[19] 邱森. 线性代数探究性课题精编. 武汉:武汉大学出版社,2011.

[20] 邱森,朱林生. 高等代数探究性课题精编. 武汉:武汉大学出版社,2012.

[21] 陈维翰. 线性关系及其应用. 重庆:重庆大学出版社,1989.

[22] 刘学质. 线性代数的数学思想方法. 北京:中国铁道出版社,2006.

[23] 任广千,胡翠芳. 线性代数的几何意义. [EB/OL]. [2013-05-01]. http://ishare.iask.sina.com.cn/f/14346502.html

[24] Lancaster P, Tismenetsky M. The Theory of Matrices. 2nd. Orlando: Academic Press, 1985.

[25] Gohberg I, Lancaster P, Rodman L. Matrix Polynomials. New York: Academic Press, 1982.

[26] Higham N J. Functions of Matrices: Theory and Computation. SIAM, 2008.

[27] 豪斯霍尔德 A S. 数值分析中的矩阵论. 孙家昶,等,译. 北京:科学出版社,1986.

[28] 张跃辉. 矩阵理论与应用. 北京:科学出版社,2011.

[29] 徐仲,等. 矩阵论简明教程. 2 版. 西安:西北工业大学出版社,2011.

[30] 张贤达. 矩阵分析与应用. 北京:清华大学出版社,2004.

[31] 曾祥金,张亮. 矩阵分析简明教程. 北京:科学出版社,2010.

[32] 王朝瑞,史荣昌. 矩阵分析. 北京:北京理工大学出版社,1989.

[33] 史荣昌,魏丰. 矩阵分析. 3 版. 北京:北京理工大学出版社,2010.

[34] 陈公宁. 矩阵理论与应用. 2 版. 北京:科学出版社,2007.

[35] 戴华. 矩阵论. 北京:科学出版社,2001.

[36] 许以超. 线性代数与矩阵论. 2 版. 北京:高等教育出版社,2008.

[37] 吴昌悫,魏洪增. 矩阵理论与方法. 北京:电子工业出版社,2006.

[38] 于寅. 高等工程数学. 4 版. 武汉:华中科技大学出版社,2012.

[39] 陈景良,陈向晖. 特殊矩阵. 北京:清华大学出版社,2001.

[40] 孙继广. 矩阵扰动分析. 2 版. 北京:科学出版社,2001.

[41] 林生旭. 矩阵论学习辅导与典型题解析. 武汉:华中科技大学出版社,2003.

[42] 张凯院,等. 矩阵论辅导讲案. 西安:西北工业大学出版社,2007.

[43] 魏丰,史荣昌,闫晓霞. 矩阵分析学习指导. 北京:北京理工大学出版社,2005.

[44] 殷锡鸣,等. 高等数学(上). 北京:高等教育出版社,2009.

[45] 江泽坚,孙善利. 泛函分析. 2 版. 北京:高等教育出版社,2005.

[46] Lax P D. 泛函分析(影印版). 北京:高等教育出版社,2007.

[47] 李广民,刘三阳. 应用泛函分析原理. 西安:西安电子科技大学出版社,2003.

[48] 黎永锦. 泛函分析讲义. 北京:科学出版社,2011.

[49] 徐宗本. 从大学数学走向现代数学. 北京:科学出版社,2007.

[50] 雷晋干,陈铭俊. 数值分析的泛函方法. 北京:高等教育出版社,1996.

[51] 王日爽. 泛函分析与最优化理论. 北京:北京航空航天大学出版社,2003.

[52] 杜珣. 现代数学引论. 北京:北京大学出版社,1996.

[53] Van der Vorst H A. Computational Methods for Large Eigenvalue Problems. Lecture Notes, 2000.

[54] Van der Vorst H A. Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

[55] Barrett R, etc.. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. Philadelphia: SIAM, 1994.

[56] Saad Y. Numerical Methods For Large Eigenvalue Problems. 2nd. Philadelphia: SIAM, 2011.

[57] Ipsen I C F. Numerical Matrix Analysis:Linear System and Least Squares. Philadelphia: SIAM, 2009.

[58] Stewart G W. Matrix Algorithms, Volume I: Basic Decompositions. Philadelphia: SIAM, 1998.

[59] Stewart G W. Matrix Algorithms, Volume II: Eigensystems. Philadelphia: SIAM, 2001.

[60] Bai Z, etc. Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems :A Practical Guide (影印版). 北京:清华大学出版社,2011.

[61] Chu M T,Golub G H. Inverse Eigenvalue Problems:Theory,Algorithms and Applications. London:Oxford University Press,2005.

[62] Golub G H, Van Loan C F. Matrix Computations. 3rd, Baltimore: The Johns Hopkins University Press,1996.

[63] Watkins D S. Fundamentals of Matrix Computations. 2nd. NewYork: John Wiley& Sons,2002.

[64] Watkins D S, The Matrix Eigenvalue Problem: GR and Krylov Subspace Methods. Philadelphia: SIAM, 2007.

[65] Kressner D. Numerical Methods for General and Structured Eigenvalue Problems. Berlin: Springer-Verlag, 2005.

[66] Jin Xiao-qing,Wei Yi-min. Numerical Linear Algebra and Its Applications. Beijing: Science Press,2004.

[67] Saad Y. 稀疏线性系统的迭代解法(影印版). 2 版. 北京:科学出版社,2009.

[68] Golub G H,Van Loan C F. 矩阵计算. 3 版. 袁亚湘,等,译. 北京:科学出版社,2001.

[69] Trefethen L N,David Bau III. 数值线性代数. 陆金甫,关治,译. 北京:人民邮电出版社,2006.

[70] Demmel J W. 应用数值线性代数. 王国荣,译. 北京:人民邮电出版社,2007.

[71] 徐树方. 矩阵计算的理论与方法. 北京:北京大学出版社,1995.

[72] 徐树方,钱江. 矩阵计算六讲. 北京:高等教育出版社,2011.

[73] 徐树方. 控制论中的矩阵计算. 北京:高等教育出版社,2011.

[74] 徐树方,高立,张平文. 数值线性代数. 北京:北京大学出版社,2000.

[75] 曹志浩. 数值线性代数. 上海:复旦大学出版社,1996.

[76] 李大明. 数值线性代数. 北京:清华大学出版社,2010.

[77] 蒋尔雄. 矩阵计算. 北京:科学出版社,2008.

[78] Krylov A N. On the numerical solution of the equation by which in technical questions frequencies of small oscillations of material systems are determined. Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskikh i Estestvennykh Nauk ,1931, 7(4): 491—539 (in Russian).

[79] Golub G H, Kahan W. Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics: Series B,

Numerical Analysis, 1965,2 (2): 205—224
[80] Magnus R. Hestenes , Eduard Stiefel. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. Journal of Research of the National Bureau of Standards , 1952, 49 (6).
[81] Moler C B,Van Loan C F. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix,Twenty-Five Years Later. SIAM Review , 2003 , 45(1):3—49.
[82] Golub G H,Van der Vorst H A. Eigenvalue computation in the 20th century. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2000(123):35—65.
[83] Tisseur Francoise ,Karl Meerbergen. The quadratic eigenvalue problem. SIAM Rev. , 2001(43):235—286.
[84] Sleijpen G L G , Van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. SIAM Journal of Matrix Analysis and Application ,1996 (17):401—425.
[85] Sleijpen G L G, Booten G L ,Fokkema D R,Van der Vorst H A. Jacobi Davidson type methods for generalized eigenproblems and polynomial eigenproblems. BIT , 1996(36):595—633.
[86] Lanczos C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem in linear differential and integral operators. Journal of Research of the National Bureau of Standards , 1950, 45: 255—282.
[87] Wilkinson J H. 代数特征值问题. 石钟慈,等,译. 北京:科学出版社,2001.
[88] Komzsik L. Lanczos 方法演变与应用. 张伟,廖本善,译. 北京:清华大学出版社,2011.
[89] Kincaid D,Cheney W. 数值分析(影印版). 3 版. 北京:机械工业出版社,2003.
[90] Quarteroni A,Sacco R,Saleri F. 数值数学(影印版). 北京:科学出版社,2006.
[91] Burden R L,Faires J D. 数值分析(影印版). 7 版. 北京:高等教育出版社,2001.
[92] Atkinson K,韩渭敏. 数值分析导论. 3 版. 王国英,等,译. 北京:人民邮电出版社,2009.
[93] Sauer T. 数值分析. 吴兆金,王国英,范红军,译. 北京:人民邮电出版社,2010.
[94] 李庆扬,王能超,易大义. 数值分析. 5 版. 北京:清华大学出版社,2008.
[95] 白峰杉. 数值计算引论. 2 版. 北京:高等教育出版社,2010.
[96] 蔡大用,白峰杉. 现代科学计算. 北京:科学出版社,2000.
[97] 喻文健. 数值分析与算法. 北京:清华大学出版社,2012.
[98] 周国标,宋宝瑞,谢建利. 数值计算. 北京:高等教育出版社,2008.
[99] 李乃成,梅立泉. 数值分析. 西安:西安交通大学出版社,2011.
[100] 编委会. 现代应用数学手册:计算与数值分析卷. 北京:清华大学出版社,2005.
[101] 李瑞遐,何志庆. 微分方程数值解. 上海:华东理工大学出版社,2005.
[102] 石钟慈. 第三种科学计算方法:计算机时代的科学计算. 北京:清华大学出版社,2000.
[103] 顾幸生,刘漫丹,张凌波. 现代控制理论及其应用. 上海:华东理工大学出版

社,2008.
[104] 张嗣瀛,高立群. 现代控制理论. 北京:清华大学出版社,2006.
[105] 张庆灵,张雪峰,翟丁. 控制理论基础. 北京:高等教育出版社,2008.
[106] 孙即祥. 现代模式识别. 2 版. 北京:高等教育出版社,2008.
[107] 陈玲莉. 工程结构动力分析数值方法. 西安:西安交通大学出版社,2006.
[108] 傅志方,华宏星. 模态分析理论与应用. 上海:上海交通大学出版社,2000.
[109] Hartfiel D J. Matrix Theory and Application with MATLAB. Florida:CRC Press LLC,2001.
[110] Moler C B. Numerical Computing with MATLAB. 2nd. Philadelphia:SIAM, 2004.
[111] Steven Leon, Eugene Herman, Richard. ATLAST computer exercises for linear algebra. Prentice Hall,2003.
[112] Moler C B. MATLAB数值计算. 喻文健,译. 北京:机械工业出版社,2006.
[113] 张志涌,等. 精通 Matlab R2011a. 北京:北京航空航天大学出版社,2011.
[114] 邓薇. MATLAB 函数全能速查宝典. 北京:人民邮电出版社,2012.
[115] 陈怀琛,龚杰民. 线性代数实践及 MATLAB 入门. 2 版. 北京:电子工业出版社,2009.
[116] Crowe M J. A History of Vector Analysis: The Evolution of the Idea of a Vectorial System. New York: Dover Publications, 1985.
[117] Israel Kleiner. A History of Abstract Algebra. Boston: Birkhauser ,2007.
[118] Jean-Luc Dorier. Epistemological Analysis of the Genesis of the Theory of Vector Spaces. In: Jean-Luc Dorier. On the Teaching of Linear Algebra. Kluwer Academic Publishers,2000.
[119] Derbyshire J. 代数的历史:人类对未知量的不舍追踪. 冯速,译. 北京:人民邮电出版社,2010.
[120] 约翰·塔巴克. 代数学:集合、符号和思维的语言. 邓明立,胡俊美,译. 北京:商务印书馆,2007.
[121] 郭先龙. 代数学思想史的文化解读. 上海:上海三联书店,2011.
[122] 埃德温·A. 艾勃特. 平面国. 朱荣华,译. 南京:江苏人民出版社,2009.
[123] 李尚志. 线性代数教学改革漫谈. 教育与现代化,2004, 1:30—33.
[124] 孙庆华. 向量理论历史研究. 西北大学博士学位论文,2006.
[125] 孙庆华,包芳勋. 向量理论的产生与发展. 自然辩证法通讯,2011,191(1):49—54,88.
[126] 董可荣. 矩阵理论的历史研究. 山东大学硕士学位论文,2007.
[127] 莫里斯·克莱因. 古今数学思想(II~IV). 上海:上海科学技术出版社,2002.
[128] 莫里斯·克莱因. 数学:确定性的丧失. 李宏魁,译. 长沙:湖南科学技术出版社,2007.
[129] 卡茨 V J. 数学史通论. 2 版. 李文林等,译. 北京:高等教育出版社,2004.
[130] 李文林. 数学史概论. 3 版. 北京:高等教育出版社,2011.

[131] Livio M. 数学沉思录:古今数学思想的发展与演变. 黄征,译. 北京:人民邮电出版社,2010.
[132] 胡作玄,邓明立. 20 世纪数学思想. 济南:山东教育出版社,1999.
[133] 郭书春. 中国科学技术史:数学卷. 北京:科学出版社,2010.
[134] 纳欣 P J. 虚数的故事. 朱惠霖,译. 上海:上海教育出版社,2008.
[135] 马丁 · 加德纳. 矩阵博士的魔法数. 谈祥柏,译. 上海:上海科技教育出版社,2001.
[136] 贝尔 E T. 数学大师:从芝诺到庞加莱. 徐源,译. 上海:上海科技教育出版社,2004.
[137] 蔡天新. 数学与人类文明. 2 版. 杭州:浙江大学出版社,2008.
[138] 齐民友. 数学与文化. 大连:大连理工大学出版社,2008.
[139] 赫尔曼 · 外尔. 对称. 冯承天,陆继宗,译. 上海:上海科技教育出版社,2005.
[140] 马里奥 · 利维奥. 无法解出的方程:天才与对称. 王志标,译. 长沙:湖南科学技术出版社,2008.
[141] 阿 · 热(徐一鸿). 可怕的对称:探索现代物理学中的美. 荀坤,劳永军,译. 长沙:湖南科学技术出版社,1992.
[142] 吴国庆. 可爱的对称:化学家眼中的对称性. 长沙:湖南教育出版社,2001.
[143] 曹天元. 上帝掷骰子吗:量子物理史话. 沈阳:辽宁教育出版社,2008.
[144] 徐利治,郑毓信. 数学抽象方法与抽象度分析法. 南京:江苏教育出版牡, 1990.
[145] 高隆昌,李伟. 数学及其认识. 2 版. 西安:西安交通大学出版社,2011.
[146] 张奠宙,沈文选. 中学几何研究. 北京:高等教育出版社,2006.
[147] 菲利克斯 · 克莱因. 高观点下的初等数学(第二卷):几何. 舒湘芹,等译. 上海:复旦大学出版社,2008.
[148] 菲利克斯 · 克莱因. 数学在 19 世纪的发展(第一卷). 齐民友,译. 北京:高等教育出版社,2010.
[149] 菲利克斯 · 克莱因. 数学在 19 世纪的发展(第二卷). 李培廉,译. 北京:高等教育出版社,2011.
[150] 张奠宙,王振辉. 关于数学的学术形态和教育形态:谈“火热的思考”与“冰冷的美丽”. 数学教育学报, 2002, 11(2):1—4.
[151] 张奠宙. 微积分教学;从冰冷的美丽到火热的思考. 高等数学研究,2006,9(2):2—4,9(3):2—5.
[152] 邵光华. 作为教育任务的数学思想与方法. 上海:上海教育出版牡, 2009.
[153] 周述岐. 数学思想与数学哲学. 北京:中国人民大学出版社,1993.
[154] 黄秦安,曹一鸣. 数学教育原理:哲学、文化与社会的视角. 北京:北京师范大学出版社,2010.
[155] 张景中,彭翕成. 数学哲学. 北京:北京师范大学出版社,2010.
[156] 周春荔. 数学思维概论. 北京:北京师范大学出版社,2012.
[157] 钱旭红. 改变思维. 上海:上海文艺出版社,2012.
[158] 郅庭瑾. 为思维而教. 2 版. 北京:教育科学出版社,2007.

[159] 刘慈欣. 地球往事三部曲:三体,黑暗森林,死神永生. 重庆:重庆出版社,2012.
[160] 刘大椿,刘永谋. 思想的攻防:另类科学哲学的兴起与演化. 北京:中国人民大学出版社,2010.
[161] 威廉·欧文. 黑客帝国与哲学:欢迎来到真实的荒漠. 张向玲,译. 上海:上海三联书店,2006.
[162] 石中英. 教育哲学. 北京:北京师范大学出版社,2007.
[163] http://en. wikipedia. org/.
[164] http://www. mathworks. com/.
[165] http://blogs. mathworks. com/cleve/.
[166] http://www-history. mcs. st-andrews. ac. uk/.
[167] http://baike. baidu. com/.
[168] http://book. douban. com/.
[169] http://www. khanacademy. org/math/linear-algebra.
[170] http://history. siam. org/.
[171] http://www. siam. org/meetings/la09/history_talks. php.
[172] http://mathdl. maa. org/mathDL/.
[173] http://genealogy. math. ndsu. nodak. edu/.
[174] 孟岩. 理解矩阵. http://blog. csdn. net/myan/article/.

[General Information]
书名=矩阵分析与计算＝MATRIX ANALYSIS AND COMPUTATION
作者=李继根，张新发编著
页数=368
SS号=13458950
DX号=
出版日期=2013.10
出版社=武汉大学出版社